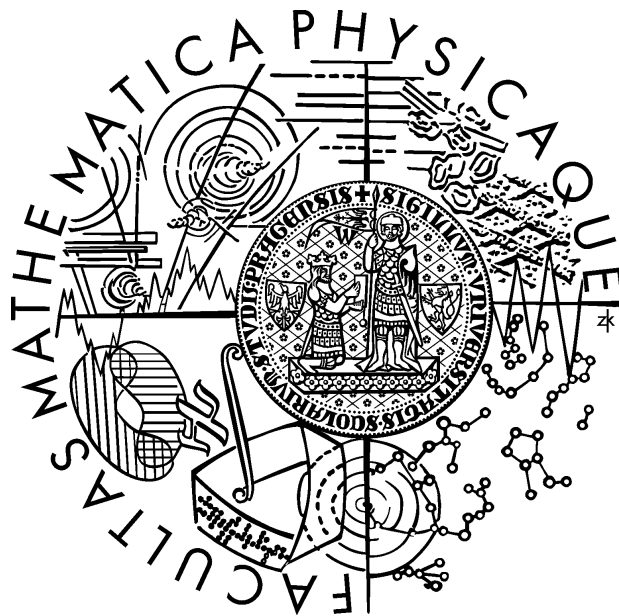


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DOKTORSKÁ PRÁCE



Mgr. Pavel Stránský

Klasický a kvantový chaos v atomových jádrech

Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí doktorské práce: Doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr.
Studijní program: fyzika, jaderná fyzika

Obsah

Seznam obrázků	ii
Předmluva	vii
1 Klasický a kvantový chaos	1
1.1 Chaos ve fyzice	1
1.2 Klasický chaos	5
1.2.1 Trajektorie	5
1.2.2 Integrabilita	6
1.2.3 KAM teorém	7
1.2.4 Metody pro odlišení regulárních a chaotických trajektorií	8
1.2.5 Regulární část fázového prostoru	18
1.2.6 Geometrický přístup ke klasickému chaosu	21
1.3 Kvantový chaos	23
1.3.1 Unfolding	25
1.3.2 Rozdělení vzdáleností nejbližších hladin	26
1.3.3 Statistiky gaussovských souborů	27
1.3.4 Regulární systémy	29
1.3.5 Smíšené systémy	29
1.3.6 Dlouhodobé korelace	35
1.3.7 $1/f$ šum	35
1.3.8 Peresova metoda	36
2 Geometrický kolektivní model	39
2.1 Základy modelu	40
2.2 Klasická dynamika	44
2.2.1 Pohybové rovnice	44
2.2.2 Výpočet f_{reg}	45
2.2.3 Regularita a chaos pomocí geometrické metody	47
2.2.4 Kompletní mapa klasického chaosu	52
2.2.5 Další rozšíření geometrického modelu	56

2.3	Kvantování	60
2.3.1	5D kvantování	60
2.3.2	2D kvantování	61
2.3.3	Diagonalizace	62
2.3.4	Brodyho parametr a srovnání klasické a kvantové dynamiky . . .	67
2.3.5	$1/f$ šum	67
2.3.6	Peresovy mříže	72
3	Shrnutí	79
A	Klasická dynamika IBM	83
B	Program	85
B.1	Zdrojový kód programu	85
B.2	Základy práce s programem	86
B.3	Globální proměnné	89
B.4	Globální kontext	89
B.5	Uživatelské funkce	91
B.6	Nápověda	91
I	Regular and chaotic vibrations of deformed nuclei with increasing γ-rigidity	95
II	Classical chaos in the geometric collective model	101
III	Order and chaos in the geometric collective model	117
IV	Quantum chaos in the nuclear collective model: Classical-quantum correspondence	125
V	Quantum chaos in the nuclear collective model: Peres Lattices	137
	Bibliografie	153
	Seznam vlastních prací	161
	Errata	163

Seznam obrázků

1.1	Trajektorie rovinného pohybu tří gravitačně se přitahujících hmotných bodů.	3
1.2	Divergence sousedních trajektorií.	4
1.3	Regulární a chaotické trajektorie GCM.	10
1.4	Poincarého řez rovinou $y = 0$ v GCM a závislost veličiny SALI na čase. . .	11
1.5	Poincarého řez rovinou $x = 0$ v GCM.	12
1.6	Časová závislost $SALI(t)$	16
1.7	Regularita v GCM v závislosti na vnějším parametru při $E = 0$	20
1.8	Unfolding spektra.	25
1.9	NNS rozdělení získané numericky v porovnání s teoretickou závislostí. . .	27
1.10	Spektra a statistiky NNS pro Poissonovo rozdělení a pro soubory náhodných matic.	30
1.11	Spektra a statistiky NNS pro Brodyho rozdělení s různými parametry ω . . .	32
1.12	Vstupně-výstupní funkce pro Brodyho rozdělení.	33
1.13	Směrodatná odchylka fitování Brodyho parametru.	34
2.1	Fázový diagram GCM.	43
2.2	Poincarého řezy rovinami $x = 0$ a $y = 0$	46
2.3	Hranice kinematically dostupné oblasti a hranice nulovosti vlastních hodnot matice \mathcal{V}	49
2.4	Závislost $f_{\text{reg}}(E)$ pro $B = 1.09$	50
2.5	Kompletní mapa regularity f_{reg} systému GCM v závislosti na parametrech modelu a na energii.	54
2.6	Poincarého řezy ilustrující odchylky od předpovědí geometrické metody v GCM.	55
2.7	Regularita při nulové energii v rozšířeném GCM (typ I).	58
2.8	Regularita při nulové energii v rozšířeném GCM (typ II).	59
2.9	Periodické trajektorie rozšířeného GCM (typ 2).	59
2.10	Test konvergence diagonalizace pro dvě rozdílné velikosti báze I.	65
2.11	Test konvergence diagonalizace pro dvě rozdílné velikosti báze II.	66
2.12	Srovnání klasické a kvantové míry regularity pro GCM s parametry $A = -1$, $B = 0.24$	68

2.13	Srovnání klasické a kvantové míry regularity pro GCM s parametry $A = -1$, $B = 0.62$	68
2.14	Srovnání klasické a kvantové míry regularity pro GCM s parametry $A = -1$, $B = 1.09$	69
2.15	Srovnání klasické a kvantové míry regularity pro GCM s parametry $A = 0$, $B = 1$	69
2.16	Srovnání klasické a kvantové míry regularity pro GCM s parametry $A = 0.25$, $B = 1$	70
2.17	Srovnání měř regularity f_{reg} , $1 - \omega$ a $\alpha - 1$ v systému GCM s parametry $A = 0$, $B = 1$	71
2.18	Srovnání měř regularity f_{reg} , $1 - \omega$ a $\alpha - 1$ v systému GCM s parametry $A = 0.25$, $B = 1$	71
2.19	Peresovy mříže pro operátory L^2 a H' v GCM ve škálování $A = -1$	73
2.20	Pokračování obrázku 2.19.	74
2.21	Peresovy mříže pro operátory L^2 a H' v GCM ve škálování $B = 1$ pro A záporné.	74
2.22	Peresovy mříže pro operátory L^2 a H' v GCM ve škálování $B = 1$ pro A kladné.	75
2.23	Peresovy mříže pro operátory L^2 a H' v GCM ve škálování $A = 1$	76
B.1	Popis oken programu.	87
B.2	Výpis souboru <code>example.gcm</code>	93
B.3	Pokračování obrázku B.2.	94

Předmluva

Jak daleko sahá platnost a přesnost postupů, které byly doposud navrženy ke studování klasických a kvantových měř chaosu ve fyzikálních systémech? Jak přesné lze očekávat souvislosti mezi klasickou a kvantovou dynamikou chaosu v neintegrabilních systémech, které netriviálně závisejí na vnějších parametrech i na energii?

Těchto otázek se pokouší dotknout předložená práce. Jejím hlavním cílem je rozvést a hlouběji zpracovat klasickou a kvantovou dynamiku geometrického kolektivního modelu (od této chvíle, pokud nebude řečeno jinak, budeme mít vždy na mysli tento model a budeme pro něj používat zkratku GCM¹), což je (z pohledu jaderné fyziky) velmi jednoduchý model kolektivní dynamiky atomových jader. Geometrický kolektivní model byl zvolen proto, že přes svoji jednoduchost vykazuje velice rozmanité chování a je na něm možné studovat řadu rozličných jevů, které se dotýkají samotných základů kvantové teorie a teorie chaosu. Naším hlavním cílem je popsat chaotickou dynamiku modelu v co největším rozsahu energií i vnějších parametrů, a proto jej budeme používat i v nerealistickém režimu velmi vysokých excitačních energií. Kromě projevů chaosu se v GCM dále intenzivně studují kupříkladu fázové přechody či kritické dynamické symetrie [Iac00, Iac01].

Tato doktorská práce navazuje na výsledky diplomové práce [Str04]. V souvislosti s diplomovou prací byl publikován článek [Cej04]² (příloha I), týkající se klasického řešení geometrického modelu v nerotujícím případě. V něm byla poprvé definována míra regularity využívající Poincarého řezů a jejím prostřednictvím ukázáno bohaté chování systému v závislosti na vnějších parametrech.

V rámci doktorského studia byly tyto klasické výsledky rozšířeny a publikovány v detailnějším článku [Str06] (příloha II). Hlavní rozšíření se týká výpočtu míry regularity v geometrickém kolektivním modelu zahrnujícím rotace okolo pevné osy. V článku jsou dále podrobně diskutovány aspekty numerických výpočtů, objevují se v něm pohybové rovnice v různých parametrizacích a nové obrazové příklady velmi komplexní dynamiky modelu. Ve studovaném modelu článek také poprvé ukazuje souvislost mezi nestabilitou trajektorií a konkavitou hranice kinematically dostupné oblasti.

Další publikace [Str07] (příloha III) rozšiřuje kinetický člen Hamiltoniánu standardního GCM a zkoumá vliv této změny na míru regularity.

Poté jsme obrátili pozornost ke kvantové dynamice geometrického kolektivního modelu v případě nulových rotací. Ukázali jsme, že model nabízí nejen možnost srovnání

¹Geometric collective model.

²Technická poznámka k citacím. Tučným písmem jsou citovány práce, jejichž jsem spoluautorem (viz seznam na straně 161, řazený chronologicky), přičemž černě [Příklad 1] jsou uvedeny články, které vyšly v recenzovaných časopisech, šedivě [Příklad 2] příspěvky do konferenčních sborníků a ostatní práce. Zbývající citace jsou psány obyčejným písmem [Příklad 3] a jejich seznam lze nalézt na straně 153 (řazený abecedně).

klasické a kvantové míry chaosu, ale rovněž umožňuje studovat spektra v různých typech kvantování. Ke srovnání jsme použili jednak standardních metod vycházejících ze statistik spekter, jednak málo užívané Peresovy metody vizualizace kvantového chaosu. Výsledky shrnují publikace [Str09a] (spektrální statistiky, různé způsoby kvantování a srovnání klasické a kvantové míry chaosu, příloha IV) a [Str09b] (využití Peresovy metody, příloha V).

Během doktorského studia jsem též spolupracoval na dvou dalších projektech. Ty se přímo netýkají předmětu této doktorské práce, a proto se jimi zde nebudeme podrobně zabývat. Pro úplnost uvedme alespoň jejich stručný popis.

První projekt se týká studia sofistikovanějšího modelu interagujících bosonů (IBM³) a srovnání jeho dynamiky s dynamikou s ním příbuzného GCM. Vypracoval jsem program na výpočet klasické míry regularity IBM (viz příloha B) a připravil výsledky pro srovnání chaotických vlastností obou modelů, viz publikace [Mac07a, Mac07b]. Srovnání kvantových verzí modelů obsahuje práce [Mac09].

Druhý projekt, na němž jsem se podílel, pojednává o kvantových fázových přechodech. Pomocí vlastního programu jsem spočítal jednak spektra jednorozměrného „cusp“ systému, jednak spektra a hustoty hladin nerotujícího GCM v oblasti fázového přechodu. Výsledky těchto výpočtů jsou součástí článků [Cej08, Cej09a].

Výsledky všech zmíněných studií byly v průběhu mého doktorského studia průběžně prezentovány na konferencích. Některé konferenční příspěvky byly v textové podobě publikovány v recenzovaných časopisech, viz již zmiňované články [Mac07b, Str07, Cej09a, Mac09], jiné byly vytištěny ve sbornících [Cej06, Cej09b, Str09c].

Text doktorské práce sleduje hlavní oblast mého zájmu, dynamiku kolektivního geometrického modelu. Obsahuje samozřejmě vysvětlení použitých přístupů ke studiu chaosu, které, pokud to bylo možné, jsem se snažil ilustrovat obrázky vycházejícími z GCM. Všechny obrázky, tedy i ty, které se netýkají geometrického modelu, jsou vlastní.

Práce je rozdělena následujícím způsobem.

Kapitola 1 tvoří úvod ke kvantovému a klasickému chaosu a lze v ní nalézt podrobný popis metod, které byly použity k výpočtům. Jedná se z velké části o nové postupy, které se objevily teprve nedávno a nejsou ještě součástí dostupných monografií. Zdůraznil bych zejména metodu SALI pro efektivní studium klasického chaosu, metodu využívající aparátu Riemannovy geometrie, metodu Peresových mříží či metodu $1/f$ šumu.

Kapitola 2 popisuje stručně geometrický kolektivní model jaderné dynamiky, zejména, s ohledem na potřeby této práce, ve speciálním nerotujícím režimu. Je rozdělena na tři části. První se věnuje základům modelu. Druhá rozpracovává jeho klasickou verzi a diskutuje nové výsledky. Třetí část se zabývá verzí kvantovou a srovnáním klasických a kvantových měr chaosu.

Výsledky práce včetně všech příloh uvádí kapitola 3.

Dále jsou uvedeny dodatky, do kterých byly odsunuty části, které by narušovaly plynulost hlavního textu. Dodatek A uvádí vzorce pro studium dynamiky v klasické verzi modelu interagujících bosonů. Dodatek B je manuálem k programu, který byl v průběhu této práce vytvořen a ve kterém jsou implementovány všechny výpočty a bohaté možnosti grafického znázornění výsledků a jejich dalšího numerického zpracování.

³Interacting boson model, někdy též Interacting boson approximation (IBA).

Na konci práce jsou uvedeny přílohy I–V, které obsahují kompletně přetištěné texty důležitých vlastních článků, které se týkají geometrického kolektivního modelu a které byly publikovány v recenzovaných časopisech. Tyto články tvoří nedílnou součást práce a obsahují velkou část vlastních výsledků, které, pokud je to možné, nejsou již v hlavním textu prvních tří kapitol opakovány a je na ně odkazováno. Hlavní text tedy mimo jiné vytváří most spojující témata jednotlivých článků do ucelené formy, obohacuje je o některé obrázky, které se do nich nevešly, a rozšiřuje je novými závěry.

S prací souvisejí i webové stránky [www], které jsem v průběhu doktorského studia vytvořil a které interaktivní klikabilní formou dovolují prohlížet obrovské množství výsledků a tak získat o dynamice modelu a o použitých metodách ucelenější představu.

Na závěr této předmluvy bych rád od srdce poděkoval především svému vedoucímu Pavlu Cejnarovi za cenné rady, podporu a nesmírnou trpělivost, které mi prokazoval po celou dobu studia, a své matce za pečlivé přečtení textu a neocenitelnou pomoc s odstraňováním gramatických a stylistických chyb. Dále děkuji oběma rodičům, kolegům a přátelům, kteří mě podporovali ať už radou, povzbuzením či blízkostí, a kteří se tím nepřímou podíleli i na vzniku této práce.

Kapitola 1

Klasický a kvantový chaos

Tato kapitola si klade za cíl seznámit čtenáře se základními teoretickými východisky, které tvoří základy pro tuto práci. Neklade si v žádném případě nároky na úplnost, podrobný úvod do problematiky klasického a kvantového chaosu lze najít například v obsáhlých monografiích [Gut90, Haa92, Rei92, Sto99]. Zde bude zmíněno pouze to, co je pro tuto práci podstatné či co se v uvedených knihách nevyskytuje.

První část této kapitoly popisuje, kde a kdy se ve fyzice začal používat pojem chaos, a ukazuje na souvislosti, ale i rozdíly v chápání tohoto pojmu oproti jeho významu v běžném světě. Druhou částí se již naplno ponoříme do světa fyziky. Budeme se v ní zabývat chaosem v klasické mechanice, zejména pak metodami rozlišení regulárních a chaotických trajektorií. Největší důraz je kladen na metodu SALI, metodu velice rychlou a efektivní. Dále nadefinujeme míru chaosu a ukážeme i meze její platnosti, resp. přesnosti. Zbytek této části bude věnován geometrickým metodám ztotožňujícím dynamický systém s pohybem na Riemannovské varietě vybavené metrikou a tudíž nabízejícím využití celý aparát diferenciální geometrie.

Ve třetí části se obrátíme k chaosu kvantovému. Zavedeme Brodyho parametr jako kvantový analog klasické míry chaosu, umožňující do určité míry kvantitativní srovnání chaotičnosti klasické a kvantové verze libovolného systému. Popíšeme také technické aspekty výpočtu Brodyho parametru. Zbytek bude věnován popisu metody využívající šumu časových řad vzniklých jednoduchou transformací spektra (metodou $1/f$ šumu) a metodou Peresových mříží.

1.1 Chaos ve fyzice

V této úvodní sekci se pokusíme vymezit pojem chaos tak, jak se dnes používá ve fyzice a v matematice. Hlavním cílem je ukázat podobnosti a rozdíly vůči intuitivnímu chápání tohoto slova v běžném životě, ale také nenásilně uvést čtenáře do problematiky studia chaosu.

Pravděpodobně prvním, kdo ve fyzice upozornil na jevy, pro které se dnes vžilo označení chaotické, byl na přelomu 19. a 20. století matematik J. H. Poincaré. Do té doby se o klasické Newtonovské mechanice předpokládalo, že je plně schopna popsat stav libovolného systému (a v nejtěžadostivějším případě celého vesmíru) v jakémkoliv čase, pokud budeme dostatečně přesně znát počáteční podmínky každé součásti uvažovaného systému a všechny síly působící mezi nimi. Vzorovým příkladem byla v té

době nebeská mechanika, která dokázala předpovídat polohy kosmických těles s velkou přesností dlouhou dobu do budoucnosti nebo rekonstruovat jejich polohy v minulosti a všeobecně se mělo za to, že zpřesňování astronomických měření povedou k dalšímu prodlužování těchto předpovědí. Věřilo se, že totéž platí i pro mikrosvět¹.

Nebeské mechaniky se ostatně týkala zmíněná Poincarého práce [Poi90], jejíž prvotní motivací bylo nalézt univerzální poruchovou metodu, která by umožňovala s libovolnou přesností spočítat souřadnice libovolného počtu gravitačně se přitahujících těles (aproximovaných hmotnými body) v libovolném čase. Poincaré ukázal, že tato poruchová metoda obecně diverguje, a to již v případě, kdy máme hmotné body tři. Zatímco systém dvou hmotných bodů je zcela pravidelný a periodický, pro tři se při určitých počátečních polohách a rychlostech tato periodicitu ztrácí a objevuje se extrémní citlivost na přesnost počátečních podmínek. Vzdalování dvou sousedních trajektorií roste exponenciálně s časem a ve chvíli, kdy se jejich vzdálenost přiblíží typickým rozměrům systému (což může být například průměrná vzdálenost jednotlivých nebeských těles), trajektorie se přestanou sobě nadále podobat.

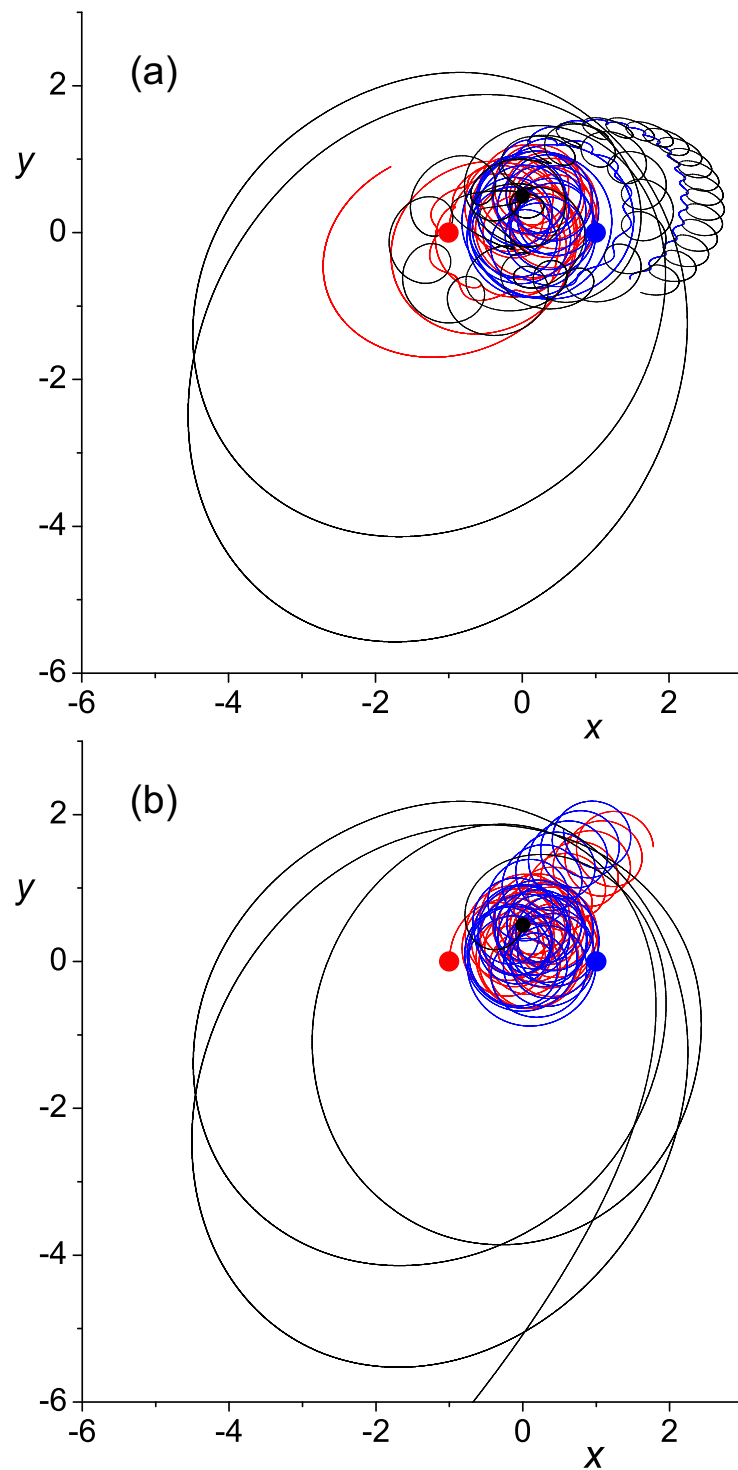
Příklad citlivosti na volbu počátečních podmínek je znázorněn na obrázku 1.1. Jedná se o rovinný pohyb tří gravitačně se přitahujících hmotných bodů v těžištové soustavě (vazba na rovinu je podmínka vložena z venku z důvodu snazšího zobrazení tohoto případu; v prostoru je situace ještě složitější). Počáteční poloha bodu označeného černě je v panelu (b) o 0.002 % posunuta vůči počáteční poloze v panelu (a). Po určitý čas se hmotné body v obou případech pohybují po vzájemně nerozeznatelných trajektoriích. Od určitého času (v jednotkách našeho systému od $t \approx 80$) se však stav systémů (a) a (b) začne výrazně odlišovat a od té doby si obě řešení žijí jakoby vlastním životem. Zatímco v systému (a) je černý hmotný bod připoután gravitačním působením ke zbývajícím hmotným bodům, v systému (b) je od nich odmrštěn. Toto je chvíle, ve které se odchylka dvou sousedních trajektorií svou velikostí přiblíží k charakteristickým rozměrům systému. Jelikož je systém vázaný, průměrná velikost odchylky nemůže dále růst. Další vývoj obou systémů však bude probíhat po kvalitativně zcela odlišných cestách.

Pro ještě lepší ilustraci tohoto případu je na obrázku 1.2 znázorněna i vzájemná vzdálenost černých hmotných bodů systémů (a) a (b) v závislosti na čase t . Na obrázku jasně pozorujeme exponenciální nárůst odchylky.

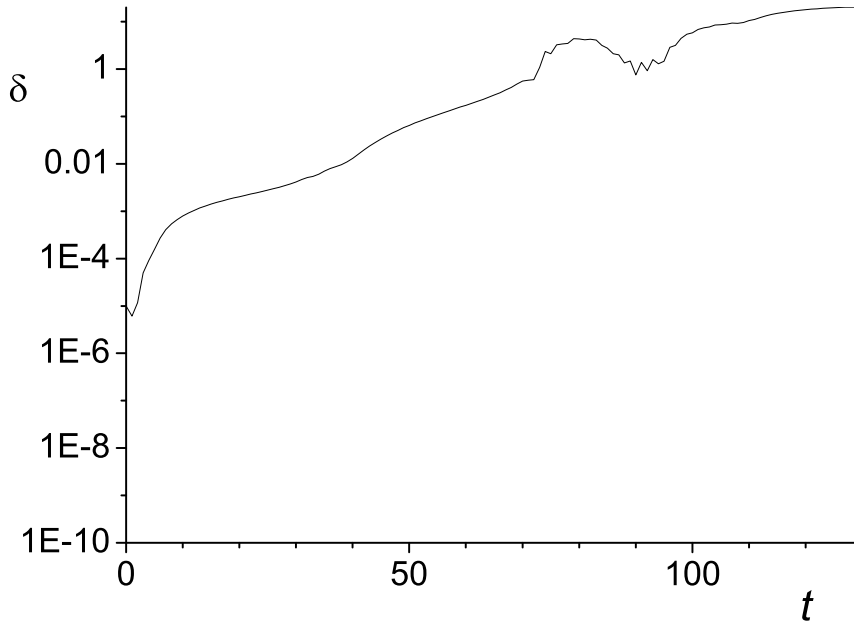
Nutno podotknout, že tato zlomová Poincarého práce, která zasadila ránu iluzorní představě absolutního determinismu vesmíru a prvně ukázala na „chaotické“ vlastnosti klasické mechaniky (ač Poincaré sám slovo chaos nepoužil), zůstala širší vědeckou fyzikální komunitou nepovšimnuta. Byla v té době zastíněna velkými objevy v jiných oblastech fyziky, jako byly elektromagnetismus, teorie relativity a kvantová mechanika. Navíc nebylo ještě možné podat podrobnou numerickou studii, která by jeho závěry vizualizovala a tak pomohla rozpoutat živější diskuzi, a proto přežívala spíše jako pozoruhodnost na poli matematiky.

Podrobné numerické výpočty se objevily až v době prvních počítačů v druhé polovině 20. století. Jedním z iniciátorů nového směru výzkumu se stal E. N. Lorenz. V této době publikoval práce [Lor63, Lor69] týkající se modelování jevů v atmosféře pomocí jednoduchých soustav nelineárních diferenciálních rovnic. Narozdíl od Poincarého

¹Tato deterministická představa naneštěstí přežívá dodnes, podpořena jednoduchými učebnicovými případy, jako jsou například pohyb volného hmotného bodu nebo matematické kyvadlo. To jsou však ve skutečnosti jen vzácné příklady opravdu přesně deterministických systémů.



Obrázek 1.1: Trajektorie rovinného pohybu tří gravitačně se přitahujících hmotných bodů s hmotnostmi $m_1 = m_2 = 1$, $m_3 = 0.2$ a počátečními podmínkami $\mathbf{r}_1 = -\mathbf{r}_2 = (1, 0)$, $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 = (0, -0.6)$, $\mathbf{p}_3 = (0, 0)$, lišícími se pouze u polohy černého tělesa (a) $\mathbf{r}_3 = (0, 0.5)$, (b) $\mathbf{r}_3 = (0, 0.50001)$. Hamiltonova funkce tohoto systému je $H = \sum_{i=1}^3 \mathbf{p}_i^2 / 2m_i + \sum_{i \neq j} m_i m_j / |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, energie je $E = -0.498$, systém je tedy vázaný. Trajektorie jsou zobrazeny pro 150 časových jednotek systému.



Obrázek 1.2: Diference $\delta(t) \equiv \left| \mathbf{r}_3^{(a)}(t) - \mathbf{r}_3^{(b)}(t) \right|$ černě označených hmotných bodů z obou panelů obrázku 1.1.

práce se Lorenz věnoval systémům nekonzervativním, tj. systémům, které si s okolím vyměňují energii. Ani on ve svých úvodních pracích nepoužívá slovo chaos, setrvává u přesně matematicky zavedených pojmů, zmiňuje se o nestabilitě a neperiodicitě jím nalezených řešení diferenciálních rovnic, o turbulentním proudění, poukazuje opět na citlivou závislost na počátečních podmínkách (s tím souvisí tzv. efekt motýlích křídel², který on zpopularizoval — mávnutí motýlích křídel může v konečném důsledku způsobit tornádo³). Byla objevena spousta dalších systémů, ve kterých je možné chaos studovat experimentálně. To zahrnuje například i velmi primitivní experimentální zařízení — kapající vodovodní kohoutek [Dre91, Sar94].

S rychlým rozmachem teorie nelineární dynamiky se pro toto odvětví fyziky postupně začalo používat populární, emotivně zbarvené a mytologií opředené slovo chaos. Slova chaos pochází z řeckého $\chi\alpha\omicron\varsigma$, jehož význam je prázdnota, bezdná hlubina. Řeční filozofové toto slovo užívali k označení stavu vesmíru před stvořením našeho světa, stavu, který je v neustálém dialogu se svým protikladem, s řádem, a svět je prostoupen tímto napětím. V dnešní době se v běžné mluvě pod chaotickým stavem podle běžných výkladových slovníků rozumí stav bez zjevného pořádku, stav úplného zmatku a nedostatku řádu. Ve fyzice a matematice pak je spojován zejména s citlivou závislostí řešení pohybových (diferenciálních) rovnic na počátečních podmínkách a nemožností předpovědi stavu systému na dlouhou dobu dopředu. Je dobré si uvědomit, že již zde dochází k určitému významovému posunu slova chaos. Pohybové rovnice totiž bývají dobře známy

²Butterfly effect.

³Na otázku, zda bylo opravdu tornádo způsobeno malým motýlem, však nejsme schopni nalézt odpověď. K tomu bychom museli mít možnost systém — zemskou atmosféru — nechat vyvíjet dvěma různými způsoby: s motýlí poruchou a bez ní. Ve světě se vždy realizuje pouze jedna možnost.

a systém se jimi bez okolků řídí, do hry nevstupují žádné „chaotické“ vlivy. Z tohoto důvodu bývá tento chaos nazýván *deterministický*.

Spolu s chaosem klasickým se začal také záhy studovat chaos kvantový, který má ještě podivnější vlastnosti, které jsou v protikladu s běžným chápáním slova chaos. V kvantové fyzice chaos jako takový neexistuje (Schrödingerova rovnice je lineární, existuje jev kvantového potlačení chaosu). Zatímco základním produktem, který získáme řešením rovnic klasické fyziky, jsou trajektorie, v kvantové fyzice je to spektrum energetických hladin, případně vlnové funkce. Studujeme-li současně klasickou a kvantovou verzi jednoho systému (klasickou limitu kvantového systému nebo naopak nakvantovaný systém klasický), ukazuje se, že chaotičita klasického systému se na kvantové úrovni projeví ve specifických korelačních vlastnostech spektra, přičemž paradoxně spektra odpovídající chaotickým systémům vykazují silnější korelace než spektra systémů nechaotických (regulárních). Pokud kvantový systém nemá klasický protějšek, pak se dnes dokonce jen na základě spektrálních vlastností systému kvantový chaos definuje. Kvantový chaos lze tedy studovat i v systému, jehož klasickou limitu neznáme. Dokonce i o samotném spektru, získaný například experimentem, lze hovořit jako o chaotickém či nechaotickém.

1.2 Klasický chaos

V této části přesněji zavedeme veličiny týkající se klasického chaosu a jeho měření. Ukážeme, jak chaotičnost systému souvisí s neintegrabilitou, a budeme demonstrovat dva základní projevy chaosu v klasické fyzice: *dynamický*, který souvisí s již zmíněnou nestabilitou trajektorií, a *strukturální*, projevující se v topologii fázového prostoru. Vycházet budeme z Hamiltonovy formulace klasické mechaniky a omezíme se navíc na *konzervativní systémy*, tj. systémy, jejichž Hamiltonova funkce není explicitní funkcí času.

1.2.1 Trajektorie

Jeden ze základních pojmů, který se v klasické fyzice používá, je *trajektorie*. V základním významu tohoto slova se jedná o dráhu jednotlivých těles (či jiných součástí systému) znázorňovanou v prostoru souřadnic (v konfiguračním prostoru). Trajektorie lze připsat i mnohem komplexnějším stupňům volnosti, například v našem případě geometrického kolektivního jaderného modelu deformacím tvaru. Počet stupňů volnosti budeme označovat v celém dalším textu jako N .

V Hamiltonovské formulaci mechaniky do hry vstupují kromě souřadnic $\mathbf{q} \equiv (q_1, \dots, q_N)$ ještě kanonicky sdružené hybnosti $\mathbf{p} \equiv (p_1, \dots, p_N)$. Známe-li Hamiltonovu funkci systému $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ a počáteční podmínky, můžeme určit souřadnice a hybnosti v libovolném čase pomocí Hamiltonových kanonických rovnic

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad (1.1)$$

a jejich časový vývoj znázornit čarami — trajektoriemi — ve $2N$ -rozměrném fázovém prostoru. Od této chvíle budeme za trajektorii považovat trajektorii ve fázovém prostoru, pokud nebude výslovně řečeno jinak. Pro bod takovéto trajektorie v čase t budeme

v dalším textu užívat zkrácené označení $\mathbf{x}(t) \equiv (\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$. Hamiltonovy rovnice pak lze souhrnně psát ve tvaru

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{W}(\mathbf{x}) \quad \mathbf{W}(\mathbf{x}) \equiv \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \right). \quad (1.2)$$

V našich úvahách se omezíme na speciální podtřídu Hamiltonovských systémů, *konzervativními systémy*. Jejich Hamiltonova funkce není explicitní funkcí času a pro danou trajektorii má ve všech jejích bodech stejnou hodnotu. Je tedy zachovávaná veličina. Označuje se energie systému.

O Hamiltonovské dynamice se také často hovoří jako o dynamice *toků*: Místo jedné trajektorie uvažujeme celou spojitou množinu trajektorií, kterou si lze představit jako tekutinu ve fázovém prostoru. Jednotlivé trajektorie pak mají roli proudnic takovéto tekutiny. V konzervativních systémech je navíc tato tekutina nestlačitelná (v průběhu časového vývoje nemění svůj objem). Toto tvrzení se nazývá Liouvilleův teorém [Gut90].

1.2.2 Integrabilita

Integrabilita je důležitá vlastnost, která od sebe odděluje třídy regulárních a chaotických systémů. Je-li systém integrabilní, pak je zcela regulární a všechny trajektorie pro všechny dostupné energie jsou stabilní.

Systém s N stupni volnosti popsáný Hamiltonovou funkcí $H(\mathbf{x})$ je integrabilní, pokud existuje právě N nezávislých integrálů pohybu $I_i(\mathbf{x})$, $i = 1, \dots, N$, přičemž integrál pohybu je funkce, jejíž Poissonova závorka s Hamiltonovou funkcí je nulová

$$\{H, I_i\} \equiv \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial I_i}{\partial q_j} - \frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial I_i}{\partial p_j} \right) \quad i = 1, \dots, N \quad (1.3)$$

a zároveň musí být všechny integrály pohybu v involuci, tj. jejich Poissonova závorka musí být nulová (podmínka nezávislosti integrálů pohybu):

$$\{I_i, I_j\} = 0, \quad i \neq j \quad (1.4)$$

Integrály pohybu jsou vždy spojeny s nějakou vnitřní symetrií studovaného systému (teorém E. Noetherové, viz například [Rei92]). Jak plyne ze vztahu (1.3) a z Hamiltonových rovnic (1.1), zachovávají se v čase:

$$\frac{dI_i}{dt} = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial I_i}{\partial q_j} \frac{dq_j}{dt} + \frac{\partial I_i}{\partial p_j} \frac{dp_j}{dt} \right) = \{H, I_i\} = 0. \quad (1.5)$$

Uvažujme nyní speciální kanonickou transformaci souřadnic a hybností. Veličiny I_i se mohou stát novými „hybnostmi“, ke kterým přejdeme z původních (\mathbf{q}, \mathbf{p}) kanonickou transformací s generující funkcí $S(\mathbf{q}, \mathbf{I})^4$. Nazveme je *akce*. Kanonicky sdružené

⁴Explicitní nalezení této kanonické transformace však může být i v relativně jednoduchém systému velmi netriviální problém.

proměnné nazveme *úhly* a označíme je θ . Hamiltonovy rovnice (1.1) pro akce a úhly znějí

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial I_i} \qquad \frac{dI_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \theta_i} = 0, \quad (1.6)$$

přičemž jsme využili toho, že veličina I_i je konstantní v čase. Z druhé z rovnic (1.6) vidíme, že Hamiltonova funkce v těchto proměnných nezávisí na úhlech. Z první pak vyplývá

$$\frac{d\theta}{dt} = \omega \quad \longrightarrow \quad \theta(t) = \omega t + \theta_0, \quad (1.7)$$

kde jsme označili $\omega \equiv \partial H / \partial \mathbf{I}$. Tyto veličiny jsou pro danou trajektorii konstantní a nazývají se *frekvence*.

Je-li uvažovaný systém omezený (vázaný), trajektorie leží na uzavřených útvarcích s topologií N -rozměrných torů⁵, které jsou vloženy do $2N$ rozměrného prostoru a pohyb v jednotlivých úhlech je periodický. Trajektorie ve fázovém prostoru jsou však periodické (uzavírají se) pouze v případě, je-li poměr všech frekvencí ω_i racionální. Proto se tento pohyb nazývá *kvaziperiodický*.

Hamiltonova funkce je v uvažovaných konzervativních systémech vždy jedním integrálem pohybu, vyjadřujícím skutečnost, že energie takového systému je zachovávaná se veličina. Integrál pohybu H sám o sobě však nelze považovat za jednu z akcí, jak by nabízelo slepé následování postupu v rovnici (1.6). Ačkoliv totiž označujeme Hamiltonovu funkci v sadách rovnic (1.3) a (1.6) stejným písmenem H , v prvním případě se jedná o funkci $2N$ dynamických proměnných \mathbf{x} , zatímco v druhém případě o zcela odlišnou funkci N proměnných \mathbf{I} . Pokud bychom chtěli vzít Hamiltonovu funkci za jednu z akcí, musel by vlastně být „funkcí sama sebe“.

Na závěr ještě jedna poznámka: Všechny konzervativní systémy s jedním stupněm volnosti jsou integrabilní s jedním integrálem pohybu, kterým je právě energie daná hodnotou H ⁶. Nejjednodušší neintegrabilní systémy dostaneme až pro $N = 2$. Do této třídy zapadá také model GCM, kterému se budeme později věnovat důkladně.

Shrňme-li závěry této části, ukázali jsme, že integrabilní systém lze kanonickou transformací převést na jednoduchý systém akce-úhel, který se ve fázovém prostoru zobrazí jako rovnoměrný pohyb. Trajektorie tohoto systému jsou vždy stabilní, jejich vzdalování je pomalejší než exponenciální. To znamená, že zpřesnění počátečních podmínek vede úměrně k odpovídajícímu zpřesnění řešení.

1.2.3 KAM teorém

Jak vypadá dynamika systému, kde dostatečný počet integrálů neexistuje? Dojde k úplnému zániku periodického pohybu, nebo periodicitu zaniká postupně s rostoucí „silou“

⁵Torus je topologický útvar, který vznikne z N -rozměrné krychle, pokud každou její „stěnu“ slepíme se stěnou protilehlou, přičemž zachováme orientaci. Například jednorozměrný torus vznikne slepením obou konců úsečky a je identický s kružnicí. Po kružnici se ve fázovém prostoru pohybuje například jednorozměrný harmonický oscilátor. Dvourozměrný torus získáme slepením protilehlých hran čtverce; slepení jednoho páru vede k válci bez podstav, následně napojení jeho protilehlých konců dá tvar obruče.

⁶V systémech s časově závislou Hamiltonovou funkcí toto neplatí. Jedním z příkladů systémů této kategorie je ve velké míře studovaný harmonický oscilátor s periodickou poruchou (kicked oscillator), viz [Rei92]

neintegrability? Na tyto otázky dává odpověď KAM teorém⁷.

Budeme uvažovat systém s Hamiltonovou funkcí

$$H(\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta}) = H_0(\mathbf{I}) + \epsilon V(\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta}), \quad (1.8)$$

kde H_0 je integrabilní část a V je neintegrabilní porucha, jejíž síla je dána parametrem ϵ . Pokud je determinant $\det \frac{\partial^2 H_0}{\partial I_i \partial I_j}$ nenulový, pak KAM teorém tvrdí, že pro dostatečně malá ϵ se začnou rozpadat pouze tory, jejichž jednotlivé frekvence ω_i jsou v poměru malých celých čísel. Speciálně v případě systému se dvěma stupni volnosti, pokud je splněna podmínka

$$|n_1 \omega_1 + n_2 \omega_2| \geq \frac{K}{(|n_1| + |n_2|)^\alpha}, \quad (1.9)$$

kde n_1, n_2 jsou celá čísla a $K > 0$ a $\alpha > 2$ jsou konstanty, trajektorie zůstává ležet na toru, který je jen slabě zdeformován poruchou V a jeho deformaci lze spočítat poruchovou teorií. V opačném případě poruchová teorie diverguje a torus se rozpadá. Dochází tedy k topologickým změnám ve fázovém prostoru.

V obecném případě tedy systém vyplní určité části fázového prostoru kvaziperiodickými trajektoriemi (zbytky torů), které budeme nazývat nadále trajektorie *regulární*. Mezi nimi budou probíhat trajektorie *chaotické* (nepravidelné), chovající se ergodicky⁸. Ergodicita nevyklučuje existenci periodických trajektorií v tomto chaotickém moři. Těchto trajektorií je ve skutečnosti nekonečně mnoho, viz [Gut90], avšak jsou izolované a nestabilní.

1.2.4 Metody pro odlišení regulárních a chaotických trajektorií

V předchozích dvou částech jsme ukázali původ vzniku regulárních a chaotických trajektorií obecného dynamického systému a zmínili některé jejich základní vlastnosti. Zde opustíme teoretické úvahy⁹ a popíšeme několik metod, které dovolují regulární a chaotické trajektorie poznat a odlišit numericky. Na základě vzájemného poměru zastoupení odlišných typů trajektorií ve fázovém prostoru později nadefinujeme měřítko regularity systému.

Tato část rozšiřuje a doplňuje výklad uvedený v pracích [Cej04, Str06, Str07] (přetištěny v přílohách I–III). V nich jsou metody pro odlišení regulárních a chaotických trajektorií rovněž diskutovány a využity k vizualizaci a numerické analýze geometrického kolektivního modelu.

Poincarého řezy

V části o KAM teorému 1.2.3 jsme ukázali, že zatímco regulární trajektorie leží ve fázovém prostoru na N -rozměrných nadplochách s topologií torů, tory chaotických trajektorií se rozpadají a tyto trajektorie vyplňují zbytek $(2N - 1)$ -rozměrné energetické

⁷Podle jmen třech autorů, kteří se podíleli na jeho formulaci a důkazu: Kolmogorov [Kol54], Arnol'd [Arn63a, Arn63b] a Moser [Mos62].

⁸Ergodicita v tomto kontextu znamená, že každá chaotická trajektorie navštíví libovolně těsné okolí libovolného bodu chaotické oblasti fázového prostoru.

⁹KAM teorém lze aplikovat pouze na systém, který máme vyjádřený v proměnných akce-úhel a navíc rozložený na integrabilní a neintegrabilní část. U obecného systému takovouto transformací nemusíme být schopni nalézt. Samotná její existence však platnost KAM teorému zaručuje.

nadplochy fázového prostoru nezaplňené regulárními tory (platí navíc, že v případě $N > 2$ je tato chaotická oblast vždy jedna a je spojitá, viz [Ber84]). Provedme nyní řez fázového prostoru nadrovinou zcela obecně zadanou rovnicí

$$P(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = 0, \quad (1.10)$$

přičemž každý průchod dané trajektorie touto rovinou v ní vyznačíme bodem. Pokračujeme-li projekcí z této nadroviny do roviny xy , dostaneme zobrazení fázového prostoru, které se nazývá *Poincarého řez*¹⁰. Příkladem nadroviny (1.10) může být například rovina

$$a_1q_1 + \cdots + a_Nq_N + b_1p_1 + \cdots + b_Np_N + c = 0. \quad (1.11)$$

Body vytvořené průchody regulárních (kvaziperiodických) trajektorií budou obecně ležet na křivkách, speciální podtřída — trajektorie periodické — se pak zobrazí jako izolované body. Chaotické trajektorie pak v rovině xy vyplní plochu.

Užitečnost Poincarého řezu se plně projeví v případě, když se omezíme na konzervativní systém s dvěma stupni volnosti $N = 2$. Jeho trajektorie leží na třírozměrné nadploše vložené do čtyřrozměrného fázového prostoru. Řez (1.11) dále omezí jednu souřadnici, takže při vhodné volbě každý bod takto zkonstruovaného řezu *jednoznačně* udává nějakou trajektorii. Často se volí rovina řezu $q_2 = 0$ a do Poincarého řezu se zobrazují souřadnice (q_1, p_1) .

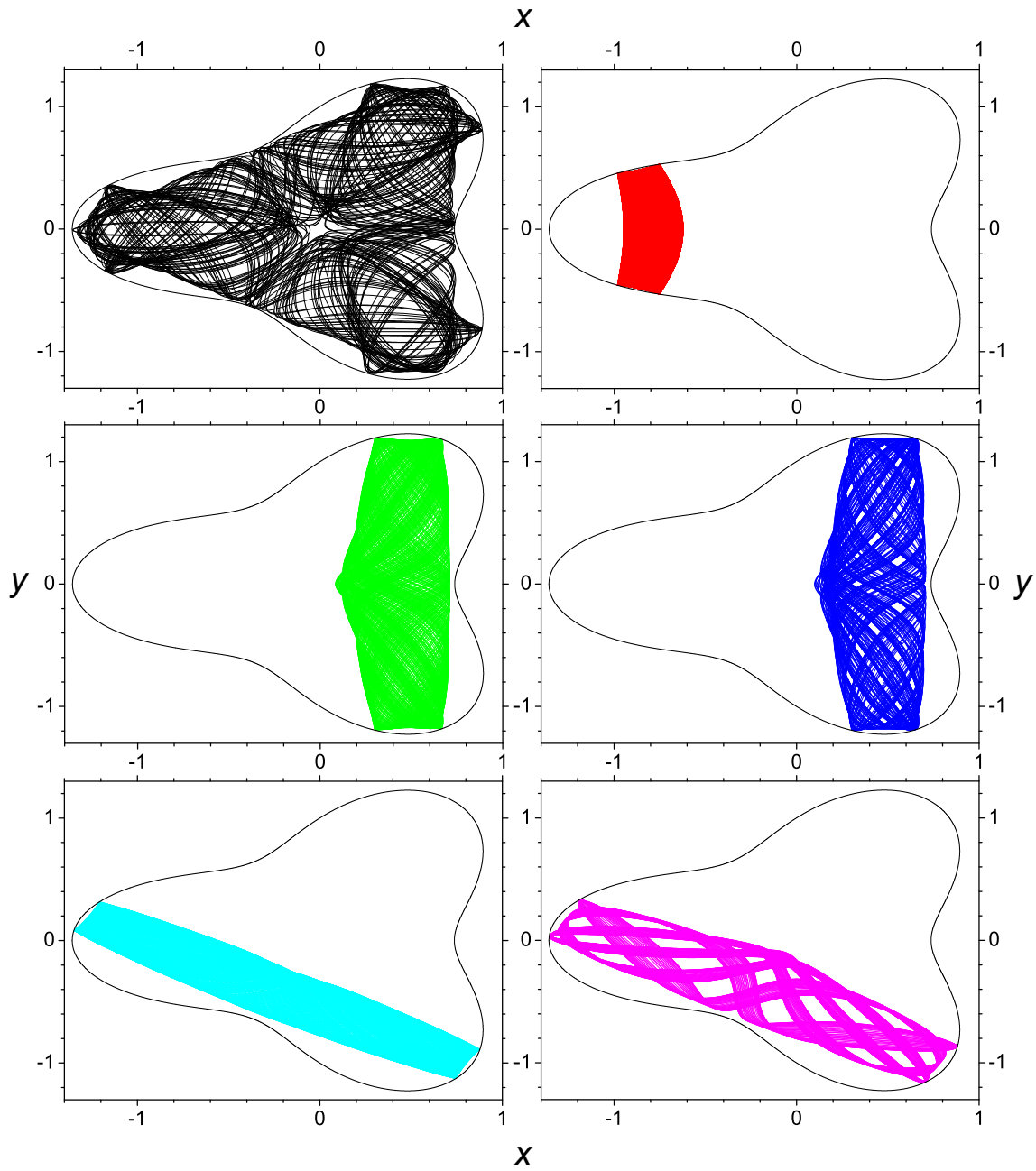
Metoda Poincarého řezů umožňuje vizuálně rozlišit regulární trajektorie od chaotických. To demonstrujeme na obrázcích 1.3–1.5. Na obrázku 1.3 je znázorněna sada šesti trajektorií neintegrabilního systému s dvěma stupni volnosti. Jedná se o systém geometrického kolektivního modelu, který popíšeme později v kapitole 2. Souřadnice systému jsou označeny x, y , odpovídající hybnosti p_x, p_y . První trajektorie (černě) je chaotická, ostatní jsou regulární. Jak jsme o regularitě trajektorií rozhodli? Na obrázku 1.4 (a) je Poincarého řez fázového prostoru rovinou $y = 0$. Chaotickou trajektorii na řezu vskutku nelze umístit na žádnou, jakkoliv deformovanou křivku. Svými body průchodu zaplňuje celou plošnou oblast. Regulární trajektorie na křivkách leží. Tyto křivky jsou vlastně průsečíky jejich torů s rovinou řezu.

Pro porovnání a bližší ilustraci metody Poincarého řezů je uveden ještě obrázek 1.5, na kterém je uveden řez stejného systému, avšak tentokrát rovinou $x = 0$. Jak je patrné z obrázku trajektorií 1.3, trajektorie znázorněné červenou, zelenou a modrou barvou rovinu řezu $x = 0$ vůbec neprotínají. Systém GCM však podléhá určitým symetriím (viz kapitola 2), jmenovitě je invariantní vůči pootočení souřadných os o úhel $2\pi/3$. Z toho vyplývá, že trajektorie zelená a modrá jsou analogiemi trajektorií tyrkysové a fialové. Proto není nutné je na obrázku 1.5 vyšetřovat zvlášť. Trajektorie červená byla o úhel symetrie otočena, čímž jsme docílili toho, že začala protínat rovinu řezu. Proto může být na obrázku zobrazena.

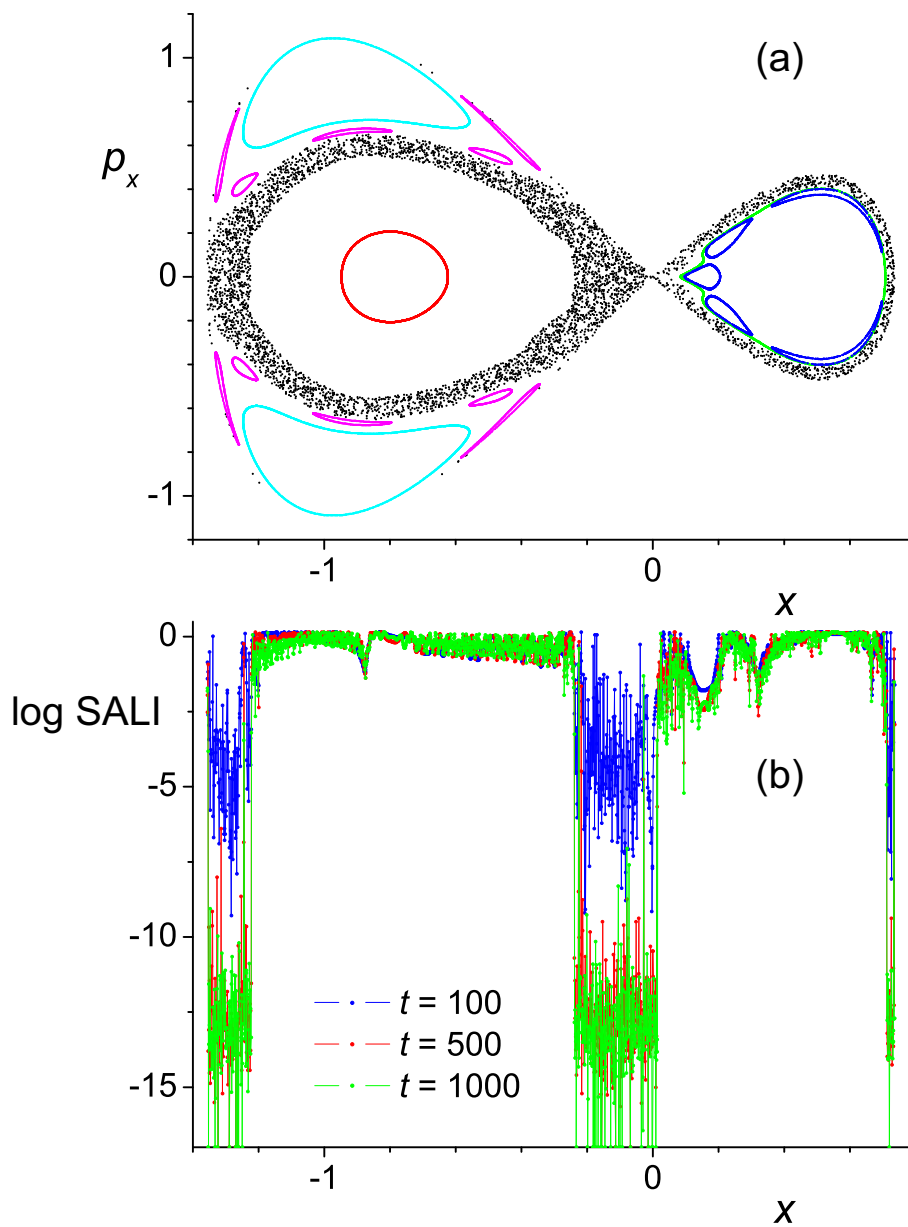
Zobrazení Poincarého řezů se také podrobně věnují přílohy I–III. V příloze II je navíc demonstrováno, že pro systémy s více než 2 stupni volnosti dojde k rozmývání ostrých hranic mezi regulárními ostrovy a chaotickým mořem okolo.

K Poincarého řezům se ještě vrátíme později v sekci 1.2.5 při zavádění kvantitativní míry chaosu.

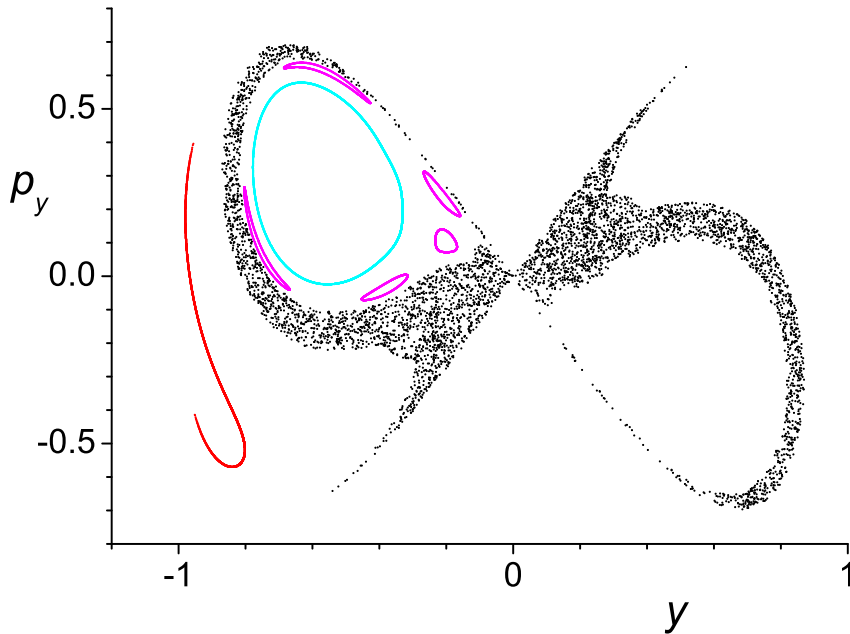
¹⁰Poincaré section nebo Poincaré surface of section.



Obrázek 1.3: Sada šesti trajektorií, vypočítaných v geometrickém kolektivním modelu (kapitola 2) pro parametry $A = -1$, $B = 0.62$, $C = 1$, $K = 1$, energii $E = 0$ a čas $t = 1000$, vše v jednotkách modelu. Silnou černou čarou je ohraničena kinematically dostupná oblast. Trajektorie v prvním panelu je chaotická, ostatní jsou regulární, ležící na deformovaných torech.



Obrázek 1.4: (a) Poincarého řez rovinou $y = 0$ geometrického kolektivního modelu se stejnými parametry jako na obrázku 1.3. Pro každou trajektorii z obrázku 1.3 je znázorněno odpovídající barvou 5000 průchodů rovinou řezu. (b) Velikost veličiny $\text{SALI}(t)$ pro časy $t = \{100, 500, 1000\}$ a pro 2000 trajektorií, které začínají na přímce $p_x = 0$ Poincarého řezu (a). Pro trajektorie z chaotických oblastí řezu pozorujeme prudký pokles velikosti $\text{SALI}(t)$ již pro krátké časy t .



Obrázek 1.5: Poincarého řez rovinou $x = 0$ geometrického kolektivního modelu se stejnými parametry jako na obrázku 1.3. Pro každou trajektorii z obrázku 1.3, která protíná rovinu řezu, je znázorněno body 5000 průchodů. Červená trajektorie byla otočena o úhel symetrie $2\pi/3$, aby rovinou řezu procházela.

Lyapunovovy exponenty

V současné době patrně nejznámější metoda rozlišující regulární a chaotické trajektorie je metoda založená na Lyapunovových exponentech¹¹. Existuje velké množství literatury, která se Lyapunovovými exponenty zabývá, a to jak z teoretického, tak numerického hlediska. Tato práce vychází zejména z monografií [Gut90, Cvi08] a článků [Sko01, Sko04].

V dynamickém systému je Lyapunovův exponent definován jako limita

$$\sigma \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|\boldsymbol{\delta}(t)\|}{\|\boldsymbol{\delta}(0)\|}, \quad (1.12)$$

kde $\boldsymbol{\delta}(t)$ je odchylka dvou infinitezimálně blízkých trajektorií $\boldsymbol{x}^{(1)}(t)$, $\boldsymbol{x}^{(2)}(t)$ ve fázovém prostoru v čase t , jestliže počáteční odchylka v čase $t = 0$ byla $\boldsymbol{\delta}(0)$. $\|\cdot\|$ označuje Eukleidovskou normu vektorů ve fázovém prostoru. Lyapunovův exponent tedy udává *průměrné exponenciální vzdalování blízkých trajektorií*. Jak bylo zmíněno v úvodu k této kapitole, nestabilní chaotické trajektorie se vzdalují exponenciálně, jejich Lyapunovův exponent je tedy kladný. Naopak regulární trajektorie mají $\sigma = 0$. Takto definovaný Lyapunovův exponent nemůže být záporný, jak bude zřejmé z dalšího textu.

V souvislosti s uvedenou definicí je zmiňme tři poznámky týkající se zejména numerických aplikací.

¹¹V literatuře se používají názvy (maximal) Lyapunov characteristic exponent (LCE), Lyapunov characteristic exponent, Lyapunov characteristic number.

- Definice (1.12) v sobě nese nejednoznačnost vyplývající z toho, že vektor δ míchá veličiny různých fyzikálních rozměrů, což se projeví při výpočtu jeho normy. My samozřejmě můžeme souřadnice \mathbf{q} a hybnosti \mathbf{p} vhodnou volbou jednotek nannormovat tak, aby byly bezrozměrné (nebo měly shodný rozměr), avšak nikoliv jednoznačně. Fázový prostor lze navíc různě deformovat kanonickými transformacemi, které rovněž ovlivní výsledný poměr mezi \mathbf{q} a \mathbf{p} ve vektoru δ . Z toho vyplývá, že Lyapunovův exponent, ač je bezrozměrná veličina, je pouze kvalitativní míra a nelze jeho prostřednictvím porovnávat chaocitu různých systémů, jelikož jeho absolutní velikost je vázána na parametrizaci fázového prostoru. Jako kvantitativní ukazatel může sloužit pouze v rámci jednoho systému.
- V praxi uvažujeme uzavřené systémy a konečné odchylky trajektorií δ . V těchto případech po určitém čase t_{\max} vzdálenost trajektorií s počáteční odchylkou $\delta(0)$ dosáhne velikosti systému, a tedy další vzdalování není možné. Uvedené limitě v definici (1.12) je tedy nutné rozumět tak, že výpočet uvažujeme pro velké časy za splnění podmínky $t < t_{\max}$. Doba t_{\max} závisí samozřejmě na velikosti počáteční odchylky $\|\delta(0)\|$, s jejím zmenšováním tato doba roste. Zmenšování vzdálenosti je na druhou stranu omezeno strojovou přesností počítače, na kterém výpočet provádíme, a také přesností výpočtu. V praxi se proto často užívá postupu, který vzdálenost průběžně zmenšuje v průběhu výpočtu, nebo se používá výpočetně náročnějšího postupu, při kterém se řeší přímo rovnice pro výpočet odchylek (1.14).
- V definici Lyapunovova exponentu se často navíc uvádí kvantifikátor $\max_{\delta(0)}$, neboli maximum přes všechny možné počáteční odchylky od dané trajektorie. Pro různé orientace odchylek $\delta(0)$ totiž dostáváme pro konečné časy t různé vzdálenosti. V limitě $t \rightarrow \infty$ se však směry různých odchylek, a tedy i jejich velikost, vyrovnají se směrem souhlasícím s nejvyšším Lyapunovovým exponentem (díky exponenciální závislosti tento směr převáží). Uvažování maxima má tedy význam pro numerické výpočty, pro teoretické zavedení Lyapunovova exponentu je plausibilní.

Zabývejme se Lyapunovovy exponenty podrobněji. Hamiltonovy pohybové rovnice systému s Hamiltonovou funkcí H byly uvedeny v rovnici (1.2). Nás však zajímá nejen pohybová rovnice pro danou trajektorii, ale také pro velmi blízkou trajektorii sousední, jejíž odchylku od trajektorie $\mathbf{x}(t)$ v čase t udává vektor $\delta(t)$. Za předpokladu, že je odchylka malá, můžeme provést Taylorův rozvoj okolo původní trajektorie a vzít jen nultý a první řád rozvoje

$$\frac{d(\mathbf{x} + \delta)}{dt} = \mathbf{W}(\mathbf{x} + \delta) \approx \mathbf{W}(\mathbf{x}) + \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{x}} \cdot \delta \quad (1.13)$$

a po odečtení pohybové rovnice (1.1) zbyde

$$\frac{d\delta}{dt} = \mathbf{J}(\mathbf{x}) \cdot \delta. \quad (1.14)$$

Označili $\mathbf{J}(\mathbf{x}) \equiv \partial \mathbf{W} / \partial \mathbf{x}$ a tato veličina se nazývá *Jacobiho matice* příslušející k $\mathbf{W}(\mathbf{x})$. Z posledního vztahu vyplývá, že v tomto přiblížení nezáleží na velikosti vektoru odchylky δ . Pokud totiž zavedeme nový vektor odchylek $\delta' \equiv c \delta$, kde c je libovolné nenulové číslo, tvar rovnice (1.14) zůstane naprosto stejný i pro tento nový vektor. Konstanta c v rovnici nebude nijak figurovat.

Zdiagonalizujeme-li matici J , získáme vlastní čísla $\lambda_1, \dots, \lambda_{2N}$ a příslušné normalizované vlastní vektory $\hat{e}_1, \dots, \hat{e}_{2N}$. Vektor odchylky v čase t lze pak vyjádřit jako

$$\boldsymbol{\delta}(t) = \sum_{i=1}^{2N} c_i e^{\lambda_i t} \hat{e}_i, \quad (1.15)$$

kde c_i jsou konstanty, které určíme z odchylky počáteční (stále je však třeba mít na paměti, že J , a tedy i λ_i a \hat{e}_i jsou funkcí souřadnic ve fázovém prostoru \boldsymbol{x} a jejich prostřednictvím i času). Vidíme, že vlastní čísla λ_i tvoří „lokální“ Lyapunovovy exponenty, tj. Lyapunovovy exponenty pro daný bod \boldsymbol{x} fázového prostoru. Tyto veličiny podél dané trajektorie fluktuují okolo průměrných Lyapunovových exponentů σ_i . Navíc pro ně platí tato tři tvrzení:

- Jsou reálné, jelikož matice J je symetrická.
- Sdružují se do párů s opačnými znaménky. To plyne z nulovosti stopy matice J a souvisí to se zachováním objemu fázového prostoru konzervativního systému.
- Vždy alespoň dva jsou nulové. Nulový je vždy ten, jehož vlastní vektor je tečný v daném bodě k trajektorii (směřuje podél trajektorie), viz [Gut90].

Metoda vyrovnávání směrů dvojice odchylek

V této sekci popíšeme metodu klíčovou pro naši práci — metodu vyrovnávání směrů dvou odchylek SALI¹². Poprvé byla použita Ch. Skokosem a je prezentována v článkách [Sko01, Sko04]. Dovoluje velice efektivně odlišit regulární a chaotické trajektorie smíšeného dynamického systému i v případě, že chaotičita dané trajektorie je velice slabá, tak slabá, že například podle Poincarého řezu či podle průběhu samotné trajektorie bychom hádali, že se jedná o trajektorii regulární. SALI metoda je navíc při praktickém numerickém použití robustnější a rychlejší. Tím tvoří silnou alternativu k Lyapunovovým indexům a k dalším metodám, které byly v úvodu této části práce zmíněny. Oproti metodě Poincarého řezů její výhoda zase spočívá v tom, že ji lze použít i v případě systémů s obecným počtem stupňů volnosti.

Uvažujme dva různé vektory odchylek $\boldsymbol{\delta}^{(1)}(t)$, $\boldsymbol{\delta}^{(2)}(t)$ od trajektorie ve fázovém prostoru, popsané vektorem $\boldsymbol{x}(t)$. Budeme se zajímat pouze směr o odchylek, a tak můžeme vektory v každém čase t normalizovat

$$\hat{\boldsymbol{\delta}}^{(j)}(t) \equiv \frac{\boldsymbol{\delta}^{(j)}(t)}{\|\boldsymbol{\delta}^{(j)}(t)\|} \quad j = 1, 2. \quad (1.16)$$

Navíc se omezíme na případ, ve kterém na počátku nejsou vektory odchylek paralelní ani antiparalelní, tj. skalární součin $\hat{\boldsymbol{\delta}}^{(1)}(0) \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}}^{(2)}(0) \neq \pm 1$, jinak mohou být libovolné. Jednou možností, která se jeví i výhodná pro numerické výpočty, je volit vektory navzájem kolmé mířící podél dvou souřadných os ve fázovém prostoru.

Definujme nyní *paralelní index*

$$d_p(t) \equiv \left\| \hat{\boldsymbol{\delta}}^{(1)}(t) - \hat{\boldsymbol{\delta}}^{(2)}(t) \right\| \quad (1.17)$$

¹²Smaller alignment indices.

(nulový v případě, že vektory míří stejným směrem) a *antiparalelní index*

$$d_a(t) \equiv \left\| \hat{\boldsymbol{\delta}}^{(1)}(t) + \hat{\boldsymbol{\delta}}^{(2)}(t) \right\| \quad (1.18)$$

(nulový pro navzájem opačné vektory). Menší z obou indexů označíme¹³

$$\text{SALI}(t) \equiv \min \{d_p(t), d_a(t)\}, \quad (1.19)$$

přičemž hodnota této veličiny může ležet v intervalu $0 \leq \text{SALI}(t) \leq \sqrt{2}$ (meze odpovídají případu, kdy vektory $\hat{\boldsymbol{\delta}}^{(j)}$ jsou vzájemně rovnoběžné, resp. kolmé).

Intuitivně lze očekávat, že s rostoucím časem t se budou vektory $\hat{\boldsymbol{\delta}}^{(j)}$, $j = 1, 2$ postupně otáčet do směru nejsilnějšího kladného Lyapunovova exponentu σ_i . Jejich směry se tedy budou vyrovnávat a jejich součet či rozdíl bude klesat k nule. Toto tvrzení nyní dokážeme.

Tvrzení:

Pro chaotické trajektorie platí $\text{SALI}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$, přičemž pokles je exponenciální s časem, zatímco pro trajektorie regulární $\text{SALI}(t)$ nepřestává pro $t \rightarrow \infty$ fluktuovat okolo nenulové hodnoty.

Důkaz:

Jak bylo řečeno v sekci 1.2.4, lokální Lyapunovovy exponenty λ_i jsou reálné a jejich součet je nula. Předpokládejme nyní, že průměrné Lyapunovovy exponenty

$$\sigma_i(t) = \ln \left. \frac{\|\boldsymbol{\delta}(t)\|}{\|\boldsymbol{\delta}(0)\|} \right|_{\boldsymbol{\delta}(0)=\hat{\mathbf{e}}_i(0)} \quad (1.20)$$

jen nepatrně fluktuují podél trajektorie $\boldsymbol{x}(t)$ okolo hodnot λ_i a lze je tedy těmito lokálními exponenty aproximovat. Vezměme dva vektory odchylek $\boldsymbol{\delta}^{(1)}$, $\boldsymbol{\delta}^{(2)}$ a dvě největší vlastní čísla $\lambda_1 > \lambda_2$. Díky exponenciální časové závislosti budou pro dlouhé doby ostatní vlastní čísla zanedbatelná. Dostáváme tedy přibližně

$$\boldsymbol{\delta}^{(j)}(t) \approx c_1^{(j)} e^{\lambda_1 t} \hat{\mathbf{e}}_1 + c_2^{(j)} e^{\lambda_2 t} \hat{\mathbf{e}}_2 \quad j = 1, 2, \quad (1.21)$$

a po normalizaci

$$\hat{\boldsymbol{\delta}}^{(j)}(t) = \frac{c_1^{(j)} e^{\lambda_1 t} \hat{\mathbf{e}}_1 + c_2^{(j)} e^{\lambda_2 t} \hat{\mathbf{e}}_2}{\sqrt{c_1^{(j)2} e^{2\lambda_1 t} + c_2^{(j)2} e^{2\lambda_2 t}}} \approx \frac{c_1^{(j)}}{|c_1^{(j)}|} \hat{\mathbf{e}}_1 + \frac{c_2^{(j)}}{|c_1^{(j)}|} e^{(\lambda_2 - \lambda_1)t} \hat{\mathbf{e}}_2. \quad (1.22)$$

Koeficient $c_1^{(j)} / |c_1^{(j)}|$ před vektorem $\hat{\mathbf{e}}_1$ může nabývat jen hodnot ± 1 . Při výpočtu SALI bereme minimální velikost ze součtu a rozdílu vektorů $\hat{\boldsymbol{\delta}}^{(1)}$, $\hat{\boldsymbol{\delta}}^{(2)}$ podle vztahů (1.17),

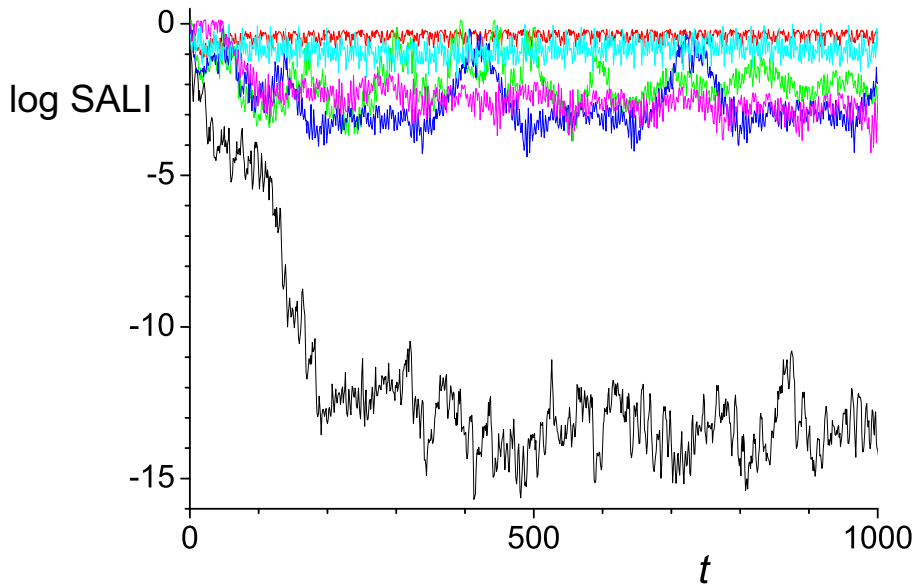
¹³Tato definice objasňuje anglický název metody.

(1.18). Minima dosáhneme, pokud se příspěvky u $\hat{\mathbf{e}}_1$ odečtou. Pak dostáváme konečný výraz

$$\text{SALI}(t) \approx \min \left| \frac{c_2^{(1)}}{c_1^{(1)}} \pm \frac{c_2^{(1)}}{c_1^{(2)}} \right| e^{(\lambda_2 - \lambda_1)t} \|\hat{\mathbf{e}}_2\| \equiv c e^{(\lambda_2 - \lambda_1)t} \|\hat{\mathbf{e}}_2\|. \quad (1.23)$$

Jelikož $\lambda_1 > \lambda_2$, dochází s rostoucím časem t k exponenciálnímu poklesu velikosti veličiny $\text{SALI}(t)$. V případě systémů s dvěma stupni volnosti existuje nejvýše pouze jeden kladný Lyapunovův exponent. Pak je $\lambda_2 = 0$ a tvrzení rovněž platí. V případě, že $\lambda_1 = \lambda_2$, pak je nutné vzít do úvahy další nejvyšší Lyapunovův exponent. Důkaz by byl v tomto případě analogický.

Numerický příklad chování a aplikace $\text{SALI}(t)$ pro systém s dvěma stupni volnosti je uveden na obrázku 1.4 (b). Každý bod na ose x odpovídá trajektorii, jejíž počáteční podmínky leží na přímce $p_x = 0$ Poincarého řezu panelu (a). Pro regulární trajektorie se $\text{SALI}(t)$ drží velkých hodnot a s rostoucím časem nevykazuje žádný systematický posun, jen oscilace. Naproti tomu pro chaotické trajektorie tato veličina rychle klesne někdy až k hodnotám pod 10^{-16} , což již je za hranicí strojové přesnosti výpočtu.



Obrázek 1.6: Časová závislost $\text{SALI}(t)$ v systému geometrického kolektivního modelu pro trajektorie z obrázku 1.3.

Pro přesnější ilustraci časové závislosti $\text{SALI}(t)$ uvádíme ještě obrázek 1.6. Tato závislost je na něm znázorněna pro vybrané trajektorie z obrázku 1.3 v odpovídajících barvách. Na tomto obrázku pozorujeme nejen dobře patrný exponenciální pokles SALI pro chaotickou trajektorii (černá čára), což je v souladu s výsledkem (1.23), ale také periodicitu pro trajektorie regulární, která vylučuje strmý pokles k nízkým hodnotám bez návratu zpět.

Při praktickém počítání SALI nám jde zejména o to rozhodnout, zda je daná trajektorie regulární či chaotická. Podle vzorce (1.23) by stačilo nechat běžet výpočet dostatečně dlouho, dokud hodnota SALI klesne pod určitou velmi nízkou hodnotu, například

pod 10^{-10} . Co však znamená dostatečně dlouho pro regulární trajektorie a jak vůbec rozlišit regulární trajektorie od chaotických, pro které je exponenciální pokles SALI velice pozvolný? Z toho důvodu modifikujeme algoritmus tak, abychom i tyto dva případy dokázali odlišit v co nejkratším výpočetním čase. Při výpočtech týkajících se této práce jsme toho docílili následujícím postupem: Sledujeme okamžitý trend SALI a také jeho oscilace. Pokud SALI klesá dostatečně rychle a nedochází k oscilacím, charakteristickým pro regulární trajektorie, vyhodnotíme trajektorii jako chaotickou. Pokud se naopak SALI trajektorie dlouho drží ve vysokých hodnotách a osciluje, pak trajektorii označíme za regulární. Pro systém geometrického kolektivního modelu, který tvoří hlavní objekt výpočtů této práce, nám v praxi stačí průměrně řádově 10 až 100 časových jednotek, abychom byli schopni rozhodnout, zda je trajektorie chaotická. Pro trajektorii regulární je to více, avšak zřítkakdy musíme počítat déle než 1000 časových jednotek.

Další metody

Na závěr této části zmíníme několik dalších metod, které dovolují prakticky rozhodnout, zda je daná trajektorie regulární či chaotická. Následující výčet si neklade nároky na úplnost a je zpracován podle článku [Sko01], kde jsou uvedeny i další reference.

Kromě metody Lyapunovových indexů a metody SALI existují tedy ještě tyto metody:

- Laskarova metoda frekvenční analýzy [Las92], vycházející z výpočtu frekvenčního spektra konečného časového úseku trajektorie a vhodná pro systémy s mnoha stupni volnosti. Pro periodické orbity takto jednoduše nalezneme charakteristické frekvence systému, zatímco trajektorie neperiodické (chaotické) vykazují spektrum spojitě.
- Studium spekter *deformačních čísel*¹⁴ [Vog94]

$$\alpha(t) = \ln \frac{\|\delta(t + \Delta t)\|}{\|\delta(t)\|} \quad (1.24)$$

(časový interval Δt mezi odchylkami je velmi malý) vycházejících z lokálních Lyapunovových exponentů. K rozhodnutí o periodičnosti či chaotičnosti trajektorie stačí zavést tzv. dynamické spektrum deformačních čísel, což je hustota pravděpodobnosti nalezení specifické hodnoty α

$$S(\alpha) \equiv \frac{1}{N} \frac{dN(\alpha, \alpha + d\alpha)}{d\alpha}, \quad (1.25)$$

přičemž N je celkový počet hodnot α , ze kterých vybíráme, a $dN(\alpha, \alpha + d\alpha)$ je počet hodnot v uvedeném rozmezí.

- *Rychlý Lyapunovský ukazatel*¹⁵ [Fro97] vylepšuje metodu Lyapunovových exponentů tím, že na počátku zvolíme ortonormální sadu $2N$ normalizovaných vektorů

¹⁴stretching numbers

¹⁵fast Lyapunov indikátor

odchylek $\hat{\delta}^{(j)}$, $j = 1, \dots, 2N$ tvořící bázi ve fázovém prostoru a v každém kroku výpočtu bereme odchylku s největší normou:

$$\text{FLI}(t) = \sup_j \left\| \hat{\delta}^{(j)} \right\|. \quad (1.26)$$

Stejně jako při výpočtu Lyapunovových exponentů $\text{FLI}(t)$ roste k nekonečnu s rostoucím časem, avšak pro chaotické trajektorie exponenciálně a mnohem rychleji než σ . Zrychlení výpočtu je důsledkem toho, že některá z odchylek musí být od počátku orientována do směru nejrychlejšího roztahování fázového objemu. Nevýhodou je samozřejmě vyšší časová náročnost této metody.

1.2.5 Regulární část fázového prostoru

Doposud jsme se zabývali pouze jednotlivými trajektoriemi. Zavedli jsme metody, které nám dovolují určit, zda je trajektorie regulární nebo chaotická, avšak zatím neumíme říci, „jak moc“ je systém chaotický. Definicí celkové míry chaotičnosti systému při dané energii se budeme věnovat v této části. Ukážeme přitom dva odlišné postupy.

První způsob kombinuje možnosti Poincarého řezů a metody SALI. Jak je patrné z obrázků Poincarého řezů 1.4 (a) a 1.5, oblasti vyplněné zbytky torů tvoří ostrovy regularity v chaotickém moři a jsou od nich odděleny hranicí (břehem). To nabízí možnost vypočítat poměr plochy řezu zaplněné regulárními ostrovy S_{reg} ku celkové ploše řezu pokryté trajektoriemi S_{tot}

$$f_{\text{reg}} \equiv \frac{S_{\text{reg}}}{S_{\text{tot}}}. \quad (1.27)$$

Tuto veličinu nazveme *regulární část Poincarého řezu*.

Celý výpočet tedy probíhá tímto způsobem:

1. Oblast Poincarého řezu si rozdělíme pravoúhlo mříží na oddělené buňky stejné velikosti.
2. Najdeme první buňku mříže, která leží v kinematicky dostupné oblasti a nebyla dosud zasažena žádnou trajektorií.
3. Uvnitř této buňky nagenерujeme počáteční podmínku a spustíme výpočet trajektorie.
4. Trajektorii počítáme tak dlouho, dokud SALI metoda nerozhodne o její regularitě či chaotičnosti.
5. Všem buňkám mříže, které tato trajektorie protнула v průběhu výpočtu SALI, přiřadíme podle jejich charakteru hodnotu 1 v případě regulární trajektorie, 0 v případě chaotické. Pokud již nějaká z těchto buněk byla označena dříve¹⁶, označíme, že byla zasažena znovu a jakým typem trajektorie a na závěr spočítáme průměr (například 2 zasažení regulární a 4 zasažení chaotickou trajektorií dává, že tato buňka přispívá do f_{reg} hodnotou $2/6 = 1/3$).

¹⁶Toto může nastat z důvodu konečné velikosti buněk.

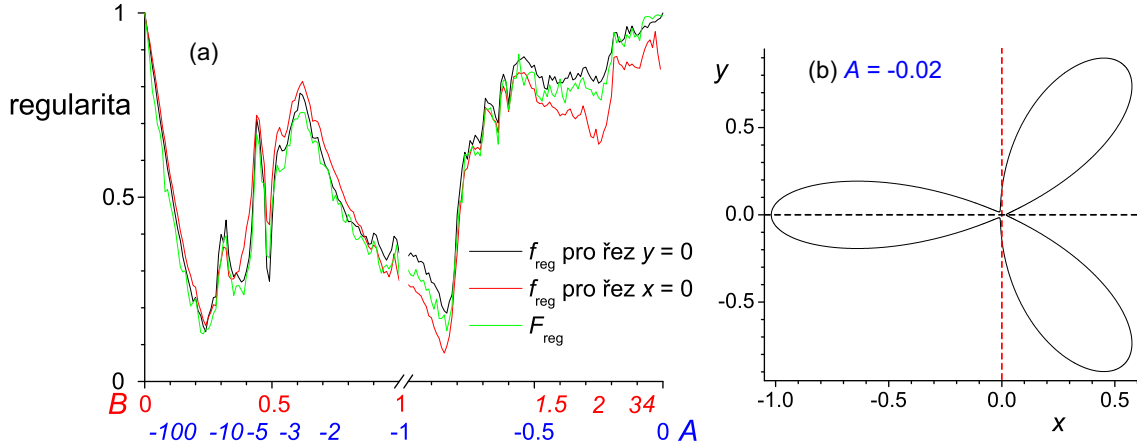
6. Postupně procházíme všechny buňky mříže a postup opakujeme od bodu 2 do té doby, než projdeme každou kinematically dostupnou buňku alespoň jednou.
7. Na závěr sečteme hodnoty ve všech kinematically dostupných buňkách a vydělíme počtem buněk. Hodnota, kterou obdržíme, aproximuje f_{reg} .

Na mříži o velikosti 100×100 buněk, kterou budeme nejčastěji používat, je potřeba rozhodnout o regularitě přibližně 300 trajektorií v případě, že je systém plně regulární, a jednotek až desítek trajektorií v případě, že je systém velmi chaotický s $f_{\text{reg}} \approx 0$.

Stejně jako v případě Lyapunovových exponentů, i u této metody je potřeba zmínit některé aspekty jejího numerického použití:

- Chaotické moře ve skutečnosti obsahuje hustou síť izolovaných periodických trajektorií [Gut90]. Tyto trajektorie jsou však nestabilní — v jakkoliv těsném jejich okolí leží trajektorie chaotické. Také počet průchodů těchto periodických trajektorií rovinou řezu je vůči počtu průchodů chaotických trajektorií množina míry nula. V praxi, generujeme-li počáteční podmínky náhodně, se pravděpodobnost zásahu nestabilní periodické trajektorie blíží nule.
- Při výpočtu postupujeme tak, že celou kinematically dostupnou oblast Poincarého řezu pokryjeme mříží a každou její buňkou vedeme trajektorii. Poté určíme, kolika buňkami procházejí regulární trajektorie, a tato hodnota je úměrná S_{reg} , přičemž konstanta úměrnosti je plocha jedné buňky. Stejným způsobem celkový počet buněk zasažených jakoukoliv trajektorií udává S_{tot} . Diskrétním dělením samozřejmě dochází k rozmazání hranic regulárních ostrovů a smazání celých ostrovů, které jsou na Poincarého řezu menší než velikost buňky. To znamená, že chyba této metody roste s „délkou břehů“ regulárních ostrovů a naopak klesá při zjemňování mříže.
- V obecném systému můžeme zvolit více rovin Poincarého řezu (1.10). Je zřejmé, že pro různé řezy bude f_{reg} vypočtené podle definice (1.27) nabývat různých hodnot. Můžeme však očekávat, že pro vhodně zvolené řezy (například takové, které žádná trajektorie nemíjí) budou hodnoty regularity podobné. To je demonstrováno na obrázku 1.7, kde je znázorněna závislost f_{reg} na vnějším parametru systému pro fixní energii. Pro dva zcela odlišné Poincarého řezy — roviny $x = 0$ a $y = 0$ — se hodnoty regulární části Poincarého řezu liší v jednotkách procent, přičemž největší odlišnosti jsou pozorovány pro $A \rightarrow 0$. Jak však vidíme na panelu (b), pro zmenšující se velikost parametru A protíná řez $x = 0$ stále menší a menší počet trajektorií (jedná se o trajektorie podobného typu, jako je zobrazena na obrázku 1.3 zeleně). Pro $A = 0$ tento řez již vůbec neexistuje.

Jelikož každý bod Poincarého zobrazení určuje jednoznačně trajektorii pouze v případě systémů s dvěma stupni volnosti $N = 2$, lze tuto metodu použít jen na tyto systémy. Ve složitějších systémech nejsme schopni zajistit takovou projekci do roviny, která by garantovala jedinečnou příslušnost bodů k trajektoriím. To znamená, že zcela mizí jasná hranice mezi regulárními a chaotickými oblastmi. Je sice možné Poincarého řez neznázorňovat do roviny, ale do vícerozměrného nadroviny, kde by jednoznačnost přiřazení bodů k trajektoriím zůstala zachována, tím ovšem výrazně roste náročnost na numerické zpracování, a také se zcela ztrácí výhoda snadné vizualizace.



Obrázek 1.7: (a) Závislost regularity v systému geometrického kolektivního modelu na vnějším parametru při energii $E = 0$. Pro $B = (0, 1)$ je voleno škálování $A = -1$, pro vyšší hodnoty na horizontální ose je škálování $A = (-1, 0)$, $B = 1$ (škálování bude vysvětleno později v části 2.1). Černou a červenou čarou je znázorněn výpočet f_{reg} pomocí metody Poincarého řezů (mříž 100×100 bodů) s odhadnutou chybou $\Delta f_{\text{reg}} = 0.02$, zeleně je označen F_{reg} ($N_{\text{tot}} = 625$) s chybou $\Delta F_{\text{reg}} = 0.04$. (b) Kinematically dostupná oblast při škálování $B = 1$ s parametrem $A = -0.02$ (černou souvislou čarou) a znázornění rovin Poincarého řezů použitých při výpočtu f_{reg} (černou a červenou přerušovanou čarou).

V případě systémů s více stupni volnosti se jako výhodnější ukazuje druhá metoda. Ta spočívá v tom, že v souboru N_{tot} trajektorií s náhodně generovanými počátečními podmínkami při dané energii určíme pomocí SALI metody počet N_{reg} trajektorií regulárních. Podíl

$$F_{\text{reg}} \equiv \frac{N_{\text{reg}}}{N_{\text{tot}}} \quad (1.28)$$

pak udává pro dostatečně velký soubor trajektorií regulární část z celkové oblasti fázového prostoru, kterou systém vyplňuje. V tomto případě lze přímo odhadnout i chybu

$$\Delta F_{\text{reg}} = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{tot}}}}. \quad (1.29)$$

Pro srovnání je i veličina F_{reg} zakreslena do obrázku 1.7. Je vidět, že i tato zcela odlišná metoda dává kvalitativně zcela shodné výsledky jako metoda pomocí Poincarého řezů. Kvantitativní odchylky jsou opět v řádu procent.

Tato metoda však také není prosta nejednoznačností. Její skrytý předpoklad spočívá v tom, že je nutné trajektorie vybírat *rovnoměrně* z energetické nadplochy ve fázovém prostoru. Toho může být v praxi obtížné docílit, zejména u vícerozměrných systémů.

Kdy jsou tedy jednotlivé metody vhodné? Metoda regulární části Poincarého řezu (1.27) je výhodná v případě systému se dvěma stupni volnosti. Počítáme-li na mříži 100×100 bodů, stačí nám jednotky (zcela chaotický systém) až stovky (zcela regulární systém) trajektorií, přičemž výsledná přesnost je v řádu jednotek procent. Pro srovnatelnou přesnost, užijeme-li metodu (1.28), potřebujeme již trajektorií řádově tisíce. Od počtu trajektorií se samozřejmě odvíjí i časová náročnost výpočtu. Pokud se však zajímáme o systémy s více stupni volnosti, druhá metoda zůstane jako jediná použitelná.

1.2.6 Geometrický přístup ke klasickému chaosu

Při studiu chaosu v klasické fyzice se nabízí využití metod diferenciální geometrie, které umožňují pohlížet na trajektorie hamiltonovského systému jako na geodetiky na Riemannově varietě vybavené příslušnou metrikou a umožňují zkoumat vztahy mezi křivostí této variety a chaotičností systému. My zde budeme sledovat postup navržený L. Horwitzem a kol. [Hor07]. Aplikací geometrických metod ukážeme jednoduché kritérium, na základě kterého lze rozhodnout, zda je neintegrabilní systém regulární či chaotický.

Uvažujme nejprve speciální typ Hamiltonovy funkce

$$H = \frac{1}{2m} g_{\mu\nu}(\mathbf{q}) p^\mu p^\nu \quad \mu, \nu = 1, \dots, N, \quad (1.30)$$

kde $g_{\mu\nu}$ je metrický tenzor (objekt symetrický vůči záměně indexů). V metrice je uložena veškerá informace, která udává dynamiku tohoto systému. Rovnice (1.30) popisuje vlastně pohyb volné částice po varietě v zakřiveném prostoru. Složky vektoru hybnosti jsme označili řeckými písmeny, abychom odlišili od hybností Hamiltonovy funkce na plochém Eukleidovském prostoru. Užíváme zde sčítací konvenci, sčítáme vždy přes stejně označený index nahoře a dole.

Ze znalosti metrického tenzoru lze odvodit rovnici pro odchylky sousedních trajektorií, a tím vlastně pro Lyapunovy exponenty. Nejprve vyjádříme složky afinní konexe¹⁷

$$\Gamma_{\alpha\beta}^\mu = \frac{1}{2} g^{\mu\rho} (g_{\rho\alpha,\beta} - g_{\alpha\beta,\rho} + g_{\beta\rho,\alpha}) \quad (1.31)$$

a z ní Riemannův tenzor křivosti

$$R_{\kappa\lambda\mu}^\rho = \Gamma_{\kappa\mu,\lambda}^\rho - \Gamma_{\kappa\lambda,\mu}^\rho + \Gamma_{\kappa\mu}^\sigma \Gamma_{\sigma\lambda}^\rho - \Gamma_{\kappa\lambda}^\sigma \Gamma_{\sigma\mu}^\rho. \quad (1.32)$$

Čárka mezi indexy je obvyklé označení pro parciální derivaci podle příslušné souřadnice. Derivujeme podle všech souřadnic uvedených za čárkou,

$$A_{\dots,\rho}^{\dots} \equiv \frac{\partial A^{\dots}}{\partial q^\rho}. \quad (1.33)$$

Pohybová rovnice pro systém s Hamiltonovou funkcí (1.30) zní

$$\frac{dq^\mu}{d\tau^2} + \Gamma_{\alpha\beta}^\mu \frac{dq^\alpha}{d\tau} \frac{dq^\beta}{d\tau} = 0 \quad (1.34)$$

a jedná se o rovnici geodetiky¹⁸ částice pohybující se na Riemannově varietě. Odchylka dvou blízkých trajektorií se bude vyvíjet podle rovnice geodetické deviace, nazývané v literatuře také Jacobiho-Levi-Civitova rovnice [Pos83]. Lze ji odvodit z pohybových rovnic (1.34) a má tvar

$$\frac{D^2}{d\tau^2} \delta^\rho + R_{\kappa\lambda\mu}^\rho \frac{dq^\kappa}{d\tau} \delta^\lambda \frac{dq^\mu}{d\tau} = 0, \quad (1.35)$$

kde τ je afinní parametr splňující

$$d\tau^2 = g_{\mu\nu} dq^\mu dq^\nu \quad (1.36)$$

¹⁷Afinní konexe umožňuje na libovolné varietě provádět transformaci souřadnic.

¹⁸Geodetika je trajektorie volné částice na zakřiveném prostoru.

a δ^μ jsou složky vektoru geodetické deviace. Absolutní derivace (označovaná také jako derivace ve směru) $D/d\tau$ je definována vztahem

$$\frac{DA^\mu}{d\tau} \equiv (A^\mu_{,\rho} + \Gamma^\mu_{\rho\sigma} A^\sigma) \frac{dx^\rho}{d\tau}. \quad (1.37)$$

Jacobiho-Levi-Civitova rovnice je geometrickou verzí rovnice pro odchylku (1.14), která dává do souvislosti stabilitu geodetiky s křivostí variety. Na základě vektoru deviace lze vypočítat aplikací definičního vztahu (1.12) Lyapunovův exponent. Touto cestou se dále ubírali autoři článků [Cas93, Pet93], kteří podrobně vypracovali teorii chaosu na zakřivených prostorech. Lyapunovovým exponentům se věnuje práce [Cas96, Ram01]. Aplikaci na jednoduchý neintegrabilní systém (široce studovaný Hénonův-Heilesův model) popisuje práce [Cer96]. Porovnává použití geometrické metody s jinými metodami a nachází dobrou shodu ve výsledcích.

Hamiltonova funkce však bývá častěji než s metrikou (1.30) zadána s kinetickým členem nezávislejícím na souřadnicích a tvořícím kvadratickou diagonální formu a s potenciálním členem nezávislejícím na hybnostech

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{q}). \quad (1.38)$$

Převod na tvar (1.30) je záležitostí volby vhodné metriky. To lze provést několika způsoby, z nichž v literatuře se nejčastěji používají tyto:

- *Jacobiho metrika*

$$g_{\mu\nu}^{(J)} = 2 [E - V(\mathbf{q})] \delta_{\mu\nu}, \quad (1.39)$$

při jejímž použití a při vhodné parametrizaci afinního parametru pomocí času přejde rovnice geodetiky (1.34) na Newtonovu pohybovou rovnici. Tím se však vytratí geometrická struktura prostoru.

- *Eisenhardtova metrika* rozšiřující konfigurační prostor o časovou souřadnici a o souřadnici spojenou s akcí

$$d\tau^2 = -2V(\mathbf{q})dt^2 + \delta_{\mu\nu}dq^\mu dq^\nu + 2dtdq^{N+1}. \quad (1.40)$$

My použijeme jinou konformní metriku, která explicitně závisí na energii

$$g_{\mu\nu} = \frac{E}{E - V(\mathbf{q})} \delta_{\mu\nu}. \quad (1.41)$$

Pro ni má rovnice geodetické deviace jednoduchý tvar [Hor07]

$$\frac{D_M^2 \boldsymbol{\delta}}{dt^2} + \mathcal{V}\mathcal{P}\boldsymbol{\delta} = 0, \quad (1.42)$$

kde afinní konexe je

$$M_{\alpha\beta}^\mu = \frac{1}{2} g^{\mu\rho} g_{\alpha\beta,\rho}, \quad (1.43)$$

\mathcal{P} je projektor do směru ortogonálního k rychlosti $v^\mu = dx^\mu/dt$ v daném bodě a složky matice \mathcal{V} jsou dány vztahem

$$\mathcal{V}_{\mu\nu} = \frac{3}{M^2 \mathbf{v}^2} V_{,\mu} V_{,\nu} + \frac{1}{M} V_{,\mu\nu}. \quad (1.44)$$

Její vlastní čísla označíme $\lambda_{\mathcal{V}}^{(j)}$, $j = 1, \dots, N$.

Horwitz a kol. [Hor07] navrhuje jednoduché kritérium stability systému při dané energii: Jsou-li všechna vlastní čísla matice \mathcal{V} kladná v celé kinematically dostupné oblasti konfiguračního prostoru, systém je stabilní. Pokud se alespoň jedno z nich objeví záporné, ukazuje to na počínající nestabilitu; systém začne být chaotický. Tvrzení lze rovněž přeformulovat pomocí Riemannova tenzoru křivosti (1.32) a z něj odvozeného Ricciho tenzoru $R_{\mu\kappa} \equiv R_{\mu\lambda\kappa}^{\lambda}$ a skalární křivosti $R \equiv R_{\mu}^{\mu}$. V řeči tenzoru křivosti záporná křivost v libovolné části kinematically dostupné oblasti indukuje nestabilitu.

Tato metoda byla nedávno testována na dvourozměrných modelech Hénonova-Heilesova systému a systému vázaných kvartických oscilátorů [Zio08] a rovněž na třírozměrných systémech [Zio07]. Ve všech případech byla pozorována dobrá shoda s referenčními metodami umožňujícími také odhalit chaoticitu (zejména s metodou Poincarého řezů).

Tato práce poskytuje velice detailní studii této metody pro geometrický kolektivní model. Jak ukážeme v další kapitole v sekci 2.2.3, navržené kritérium do velké míry souvisí s křivostí hranice kinematically dostupné oblasti. Je-li v jakémkoliv místě tato hranice konkávní, znamená to, že dovnitř proniká zvětší oblast záporných vlastních čísel matice \mathcal{V} a v systému se tedy objevují chaotické trajektorie. Ukážeme však také, že kritérium dává pouze přibližnou, nikoliv za všech okolností přesnou hranici mezi regularitou a chaosem. Přesto je tato metoda dobrým ukazatelem možné nestability, navíc velmi jednoduchým na výpočet, který spočívá vlastně jen v nalezení vlastních hodnot velmi malých matic.

1.3 Kvantový chaos

Tato práce si klade za jeden z cílů srovnání chaotických vlastností mezi klasickou a kvantovou mechanikou. Zavedení klasického chaosu bylo předmětem předchozí části. Nyní postoupíme dále směrem k chaosu kvantovému.

Kvantová mechanika je lineární teorie. Spektrum Hamiltoniánu je diskrétní, z čehož vyplývá, že časový vývoj libovolného stavu je kvaziperiodický, navíc je popsán jev kvantového potlačení chaosu [Eis94, Aba98, Fin96]. To znamená, že je nutno použít jiných metod než v klasickém případě. Byl zkoumán časový průběh překryvu vlnových balíků při evoluci generované Hamiltoniány H a $H + \delta H$ (δH představuje malou poruchu) [Per84b], dalším návrhem bylo studovat rozplývání vlnového balíku v závislosti na čase [Bal98, Bal02] (tento postup ukázal paralely s deformováním svazku trajektorií ve fázovém prostoru a umožnil definovat kvantový analog Lyapunovova exponentu). My však budeme sledovat používanější postupy vycházející ze spekter kvantových systémů a jejich statistik, jak bylo naznačeno již v úvodní části 1.1.

Statistické postupy smývají individualitu jednotlivých hladin, což může být někdy na škodu. Zatímco v klasické fyzice jsme byli schopni rozhodnout, zda je daná trajektorie regulární či chaotická, v kvantovém případě je podobné rozdělení stavů obtížnější. V této práci oživíme metodu navrženou A. Peresem [Per84a], která umožní mimo jiné vizuálně odlišit skupiny regulárních stavů od chaotických.

Studium kvantového chaosu je úzce spjato s vlastnostmi náhodných matic, zejména se statistickými vlastnostmi jejich vlastních hodnot a vlastních vektorů. Koncept náhodných matic se v matematické statistice objevil již během třicátých let 20. století. Do fyziky však pronikl až v letech padesátých v souvislosti se snahou popsat výsledky

experimentů s neutronovými rezonancemi v jaderné fyzice. Idea byla jednoduchá: Hamiltonián pro tyto rezonance (vysoce a blízko u sebe ležící excitace jádra) je již tak složitý, že elementy jeho maticové reprezentace (v nějaké zvolené bázi) lze považovat za náhodná čísla a jediným omezením jsou obecné symetrie systému. Soubor matic s takovými elementy nazveme náhodné matice.

Teorie náhodných matic samozřejmě nepopíše samotné energetické hladiny systému, avšak poskytne vhled do korelací a dalších statistických zákonitostí spekter. Po objevení aplikací této teorie ve fyzice byla podrobně rozpracována zejména F. J. Dysonem a E. Wignerem. Je systematicky vyložena v M. L. Mehtou v klasické monografii [Meh04], která se dočkala již třetího vydání (poprvé byla vydána v roce 1967).

Tato část doplňuje a rozšiřuje práce [Str09a] (spektrální statistiky) a [Str09b] (Peresova metoda), které jsou uvedeny v přílohách IV a V a které tvoří neoddělitelnou součást tohoto textu.

V prvním odstavci této části popíšeme speciální transformaci, tzv. unfolding¹⁹, který je nutno provést před zkoumáním univerzálních statistik vycházejících z oscilující části hustoty hladin a odrážejících chaotičnost či regularitu systému. Unfolding odstraní modelově závislou hladkou část hustoty hladin experimentálně nebo numericky získaných spekter, čímž se spektra převedou do tvaru, ve kterém je střední vzdálenost mezi hladinami konstantní a jednotková.

V následujícím odstavci 1.3.2 zavedeme nejužívanější statistiku pro unfoldované spektrum — rozdělení vzdáleností nejbližších hladin.

V odstavci 1.3.3 zmíníme základní vlastnosti spekter náhodných matic s důrazem na matice vybrané z tzv. *Gaussovského ortogonálního souboru* (GOE)²⁰, který popisuje jednak systémy zároveň časově a rotačně invariantní, jednak systémy časově invariantní a rotačně neinvariantní s celočíselným spinem. Podle *Bohigasovy hypotézy* [Boh84] se statistické vlastnosti jejich spekter shodují se statistikami spekter kvantových systémů, pokud je jejich klasický protějšek zcela chaotický. Naopak spektra kvantových systémů, jež mají integrabilní (plně regulární) klasické protějšky [Ber77]²¹, budou uvedena v sekci části 1.3.4.

Jak bylo ukázáno v části o klasickém chaosu, obecný systém může být *smíšený*, tj. může vykazovat zároveň jak regulární, tak chaotické chování. Za tímto účelem navrhl T. A. Brody [Bro73] rozdělení, které uměle (bez jakéhokoli hlubšího matematického zdůvodnění) interpoluje mezi nejužívanější statistikou vzdáleností nejbližších hladin systémů náhodných matic a systémů odpovídajících klasickým integrabilním systémům. Toto rozdělení tvoří základ pro analýzu kvantově–klasické korespondence a bude mu věnován podrobně odstavec 1.3.5.

Ve zbývajícím textu této části zmíníme další statistiky (část 1.3.6) a metodu měření kvantového chaosu pomocí charakteristického $1/f$ šumu ve spektrálních fluktuacích (část 1.3.7). Kapitulu uzavřeme odstavcem 1.3.8 popisující metodu Peresových mříží.

¹⁹Nejbližší český ekvivalent tohoto slova by asi bylo „rozestření“ spektra. My však v tomto případě zůstaneme u anglického výrazu.

²⁰Gaussian orthogonal ensemble.

²¹Práce [Boh84] a [Ber77] tvoří dva základní pilíře mostu mezi klasickou a kvantovou chaotickou dynamikou.

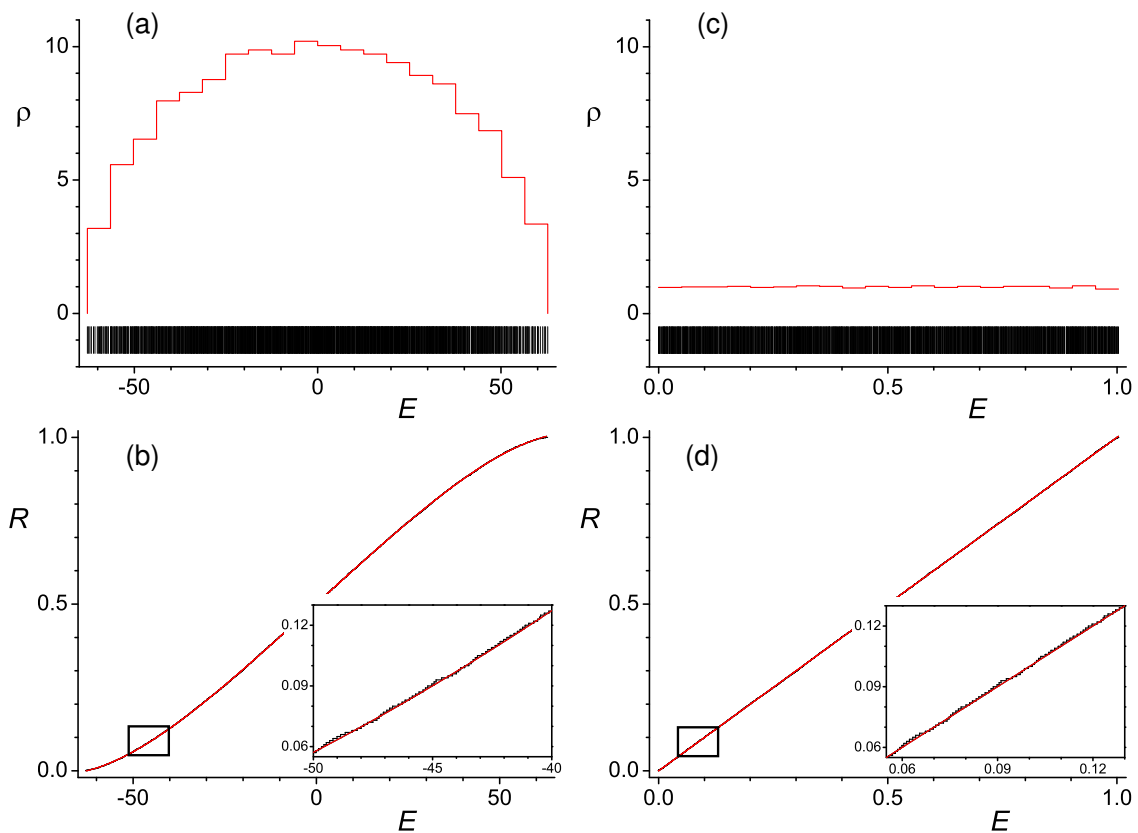
1.3.1 Unfolding

Hustota hladin naměřeného nebo na základě nějakého modelu vypočítaného spektra má obecně části: hladkou část $\bar{\rho}$ a část oscilující $\tilde{\rho}$:

$$\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \tilde{\rho}(E). \quad (1.45)$$

Na obrázku 1.8 (a) je zobrazena červenou čarou aproximace hladké části spektra, které je znázorněno černě ve spodní části panelu.

O tom, zda je systém chaotický či regulární, rozhoduje však oscilující část [Sto99]. Hladkou část je potřeba odstranit. K tomu slouží procedura zvaná *unfolding*, která přetransformuje spektrum tak, aby jeho hladká část byla konstantní.



Obrázek 1.8: Procedura unfoldování spektra získaného z náhodné matice ze souboru GOE rozměru 1000×1000 . (a) Vlastní hodnoty matice (černě) a aproximace jejich hustoty (červeně), spočítané pomocí histogramu s 20-ti intervaly. (b) Distribuční funkce vlastních hodnot (černě) a proložený polynom 5. stupně (červeně). Ve vnitřním obrázku je znázorněn detail distribuční funkce. (c) a (d) ukazují totéž jako (a) a (b), avšak pro polynomem unfoldované spektrum [na obrázku (d) je body distribuční funkce proložena přímkou].

Jednu z nejčastěji nepoužívaných procedur unfoldingu lze sledovat na obrázku 1.8. Na panelu (a) je energetické spektrum konečného kvantově chaotického systému, obsahující $n = 1000$ hladin. Hustota hladin je nejvyšší uprostřed spektra, přičemž její hladká část má teoreticky tvořit půlkruh. Distribuční funkce rozdělení hustoty hladin,

definovaná jako

$$R(E) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \theta(E - E_i) \quad (1.46)$$

(θ je skoková funkce s hodnotou 0, resp. 1, pokud je její argument záporný, resp. kladný), je znázorněna na panelu (b) černou čarou. Červeně je znázorněna aproximace distribuční funkce. Pokud známe teoretickou závislost hladké části hustoty hladin (například pro zobrazený soubor hladin je to půlkružnice), a tedy i hladkou část distribuční funkce, je nejvýhodnější volit právě ji za aproximaci. Ve většině reálných případů však teoretickou funkci neznáme a volí se tudíž nějaká univerzální aproximace, nejčastěji polynomiální. Pro názornost jsme tuto aproximaci použili i my. Proložený polynom pátého řádu $p(E)$ je znázorněn na panelu (b) červeně.

Nyní tuto aproximaci prohlásíme za hladkou část hustoty hladin $\bar{\rho}(E) \equiv p(E)$. Nové *unfoldované* spektrum pak získáme transformací

$$E'_i = \bar{\rho}(E_i). \quad (1.47)$$

Toto spektrum bude mít hladkou část své hustoty jednotkovou $\bar{\rho}'(E') = 1$, jak lze pozorovat i z panelu (c). Pro srovnání je konečně distribuční funkce pro *unfoldované* spektrum na panelu (d).

Kromě polynomiálního unfoldingu lze použít i jiné metody. Přehled těch nejpoužívanějších je uveden v článku [Ple02].

1.3.2 Rozdělení vzdáleností nejbližších hladin

V této části zavedeme nejužívanější techniku statistického zpracování spektra — rozdělení vzdáleností nejbližších hladin (NNS²²). Pro *unfoldované* spektrum udává vzdálenosti nejbližších hladin veličina

$$s_i \equiv E'_{i+1} - E'_i \quad i = 1, \dots, n-1. \quad (1.48)$$

Rozdělení těchto vzdáleností tedy podchycuje krátkodosahové korelace ve spektru. Jeho normalizovanou hustotu pravděpodobnosti označíme $P_{\text{NNS}}(s)$. Hustota je rovněž normalizovaná ke střední hodnotě (toto je splněno díky unfoldingu). Platí tedy

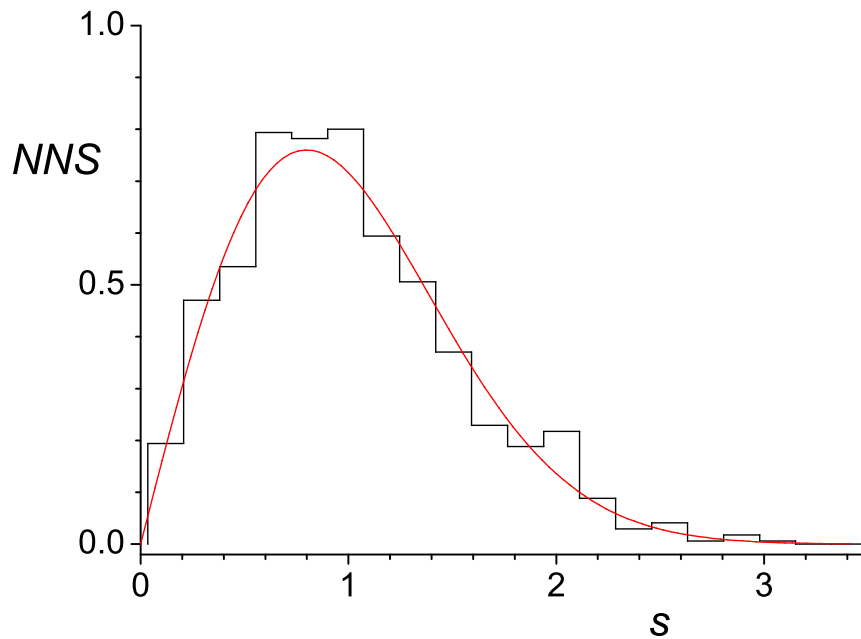
$$\int P_{\text{NNS}}(s) ds = 1 \quad \int s P_{\text{NNS}}(s) ds = 1. \quad (1.49)$$

Odhad hustoty pravděpodobnosti NNS rozdělení můžeme získat z výběrových hodnot nakreslením příslušně normalizovaného histogramu. Pro systém z obrázku 1.8 je histogram zobrazen černou čarou na obrázku 1.9. 1000 *unfoldovaných* energetických hladin je zde rozděleno do 20-ti intervalů histogramu, který je zobrazen černě.

Věnujme se chvíli teoretické předpovědi hustoty pravděpodobnosti rozdělení vzdáleností nejbližších sousedů. Již na základě pozorování (např. neutronových rezonancí měřených na jádrech), a jednoduchých úvah E. Wigner navrhl pro krátkodosahové korelace spekter následující tvrzení²³:

²²Nearest neighbour spacing.

²³Soubor těchto dvou tvrzení se v literatuře nazývá *Wigner surmise*.



Obrázek 1.9: NNS rozdělení získané numericky jako histogram s dvaceti intervaly (černě) pro spektrum z obrázku 1.8 a srovnání s přibližnou teoretickou závislostí (1.50) (červeně).

- NNS rozdělení hladin se stejným spinem a paritou má hustotu pravděpodobnosti

$$P_W(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2}, \quad (1.50)$$

přičemž $s = S/D$ je relativní vzdálenost dvou hladin vztažená ke střední vzdálenosti D v celém souboru (za předpokladu, že střední vzdálenost je v celém souboru konstantní). Unfoldované spektrum má $D \equiv 1$.

- Hladiny s různými hodnotami spinu nebo parity jsou nekorelované.

V praxi tedy musíme rozdělit hladiny do množin sdružujících stavy se stejnými kvantovými čísly. Teprve ty pak nezávisle statisticky zpracujeme a můžeme porovnat s rozdělením (1.50).

Soubor hladin z obrázku 1.8 odpovídá chaotickému systému. Jeho rozdělení NNS můžeme tedy porovnat s Wignerovým předpokladem. To je učiněno na panelu (b) obrázku 1.9, kde je Wignerova závislost znázorněna červenou čarou. Pozorujeme dobrý souhlas, odchylky jsou důsledkem statistického zpracování pouze konečného množství hodnot s_i .

Na závěr této části uveďme malé pozorování. Podle rozdělení (1.50) je velmi malá pravděpodobnost nalezení hladin blízko u sebe. Díky tomu se říká, že se sousední hladiny „odpužují“.

1.3.3 Statistiky gaussovských souborů

V tuto chvíli se zaměříme na teoretické předpovědi pro spektra a korelace ve spektrech náhodných matic odpovídajících časově invariantním systémům s celočíselným spinem

nebo časově a rotačně invariantním systémům se spinem poločíselným. Soubor těchto matic je definován na prostoru matic reálných symetrických. Označíme jej GOE. Jakákoliv matice H , má-li patřit do tohoto souboru, musí splňovat následující požadavky:

1. Soubor GOE je invariantní vůči transformaci

$$H \rightarrow O^{-1}HO \quad (1.51)$$

kde O je libovolná ortogonální matice. To jinými slovy znamená, že zavedeme-li pravděpodobnost výskytu matice H v souboru a označíme-li ji $P(H)dH$, ortogonální transformace tuto pravděpodobnost nemění:

$$P(H')dH' = P(H)dH. \quad (1.52)$$

2. Jednotlivé nezávislé elementy matice H (tj. elementy H_{ij} , $i \leq j$) jsou rovněž statisticky nezávislé²⁴. Hustotu pravděpodobnosti lze tedy faktorizovat:

$$P(H)dH = \prod_{i,j} P(H_{ij})dH_{ij}. \quad (1.53)$$

Za platnosti těchto požadavků má nejobecnější vyjádření pravděpodobnosti $P(H)$ tento tvar [Meh04]:

$$P(H) = e^{-a \operatorname{Tr} H^2 + b \operatorname{Tr} H + c}, \quad (1.54)$$

kde $a > 0$, b , c jsou reálné konstanty. Tento vzorec objasňuje, proč má soubor ve svém názvu přívlástek Gaussovský: pravděpodobnostní rozdělení jednotlivých elementů matice má podle něj Gaussovo normální rozdělení.

Pro tuto práci nás nejvíce zajímá hustota pravděpodobnosti rozdělení vzdáleností nejbližších hladin. Ta pro matice ze souboru GOE závisí na jejich rozměru a dá se jednoduše vyjádřit pouze pro případ $n = 2$, kdy je shodná s Wignerovým rozdělením (1.50). Dále se však ukazuje [Meh04], že závislost na rozměru, ač situaci komplikuje, je velice slabá, rozdíly mezi křivkami pro $n = 2$ a $n \rightarrow \infty$ jsou v řádu desetin až jednotek procent, což bývá mnohem méně, než jaká je velikost statistických chyb daných při numerickém výpočtu konečností množiny hladin, kterou máme k dispozici. Proto se v praxi běžně používá Wignerovo rozdělení i pro systémy s většími maticemi než $n = 2$.

Kromě ortogonálního souboru GOE se ještě zavádějí další dva základní soubory náhodných matic, a to unitární Gaussovský soubor GUE pro časově neinvariantní systémy a symplektický Gaussovský soubor GSE pro časově invariantní, ale rotačně neinvariantní systémy s poločíselným spinem. Pro úplnost uvedme používané aproximace pro normovaná rozdělení vzdáleností nejbližších hladin těchto souborů:

$$\begin{aligned} P_{\text{GUE}}(s) &\approx \frac{32}{\pi^2} s^2 e^{-\frac{4}{\pi} s^2} \\ P_{\text{GSE}}(s) &\approx \left(\frac{64}{9\pi}\right)^3 s^4 e^{-\frac{64}{9\pi} s^2}. \end{aligned} \quad (1.55)$$

²⁴To znamená, že ve fyzikálním systému předpokládáme stejnou pravděpodobnost (váhu) všech zúčástněných interakcí. Toto je však velmi omezující předpoklad, a proto byly vybudovány i takové soubory náhodných matic, které jej oslabují [Meh04].

Tyto vztahy jsou analogem již uvedeného Wignerova rozdělení, platné exaktně pro matice rozměru 2×2 . Jsou však dostatečně přesné pro matice větší.

Spektra s rozdělením (1.50) a (1.55) jsou znázorněna na obrázku 1.10 (a). V okolí $s \approx 0$ platí

$$P \begin{cases} \text{GOE} \\ \text{GUE} \\ \text{GSE} \end{cases} \sim s \begin{cases} 1 \\ 2 \\ 4 \end{cases}, \quad (1.56)$$

odpuzování sousedních hladin je tedy nejvyšší pro soubory GSE.

Pro studium kvantového chaosu a kvantově-klasické korespondence je velmi důležité tvrzení prvně formulované v článku [Boh84]: *Spektrum libovolného kvantového systému, jež bylo rozděleno na skupiny podle kvantových čísel a jehož klasický protějšek je zcela chaotický, má NNS rozdělení totožné se spektrem náhodných matic náležejících souboru GOE, GUE nebo GSE podle symetrií systému.*²⁵ Na základě tohoto tvrzení a na základě jeho bohatých experimentálních potvrzení byl učiněn zásadní krok, oddělující definici kvantového chaosu od klasické fyziky. Dnes se kvantový systém prohlašuje za chaotický, pokud NNS rozdělení jeho hladin odpovídá rozdělení jednoho ze zmiňovaných souborů. Klasickou limitu vůbec nemusíme znát.

Na závěr této části ještě prozradíme, že spektrum znázorněné na obrázku 1.8 bylo získáno jako spektrum náhodné matice ze souboru GOE.

Další vlastnosti všech těchto souborů lze nalézt v monografii [Meh04].

1.3.4 Regulární systémy

Podobně jako bylo pro chaotické systémy formulováno Bohigasovo tvrzení, v kvantových systémech, jejichž klasický protějšek je regulární, bylo dokázáno že rozdělení vzdáleností nejbližších sousedů se řídí Poissonovým rozdělením²⁶

$$P_P(s) = e^{-s}, \quad (1.57)$$

viz [Ber77, Ber87]²⁷. Poissonovo rozdělení mají například hladiny, které jsou zcela náhodně rovnoměrně rozmístěné na určitém intervalu. Hladiny regulárních systémů jsou tedy mezi sebou méně korelované než u systémů integrabilních.

Hladiny, jejichž NNS má Poissonovo rozdělení, jsou znázorněny rovněž na obrázku 1.10. Obrázek ukazuje, že Poissonovské spektrum má nejvíce shluků hladin a hladiny jsou nejnerovnoměrněji rozdělené. To je důsledek chybějící interakce mezi hladinami.

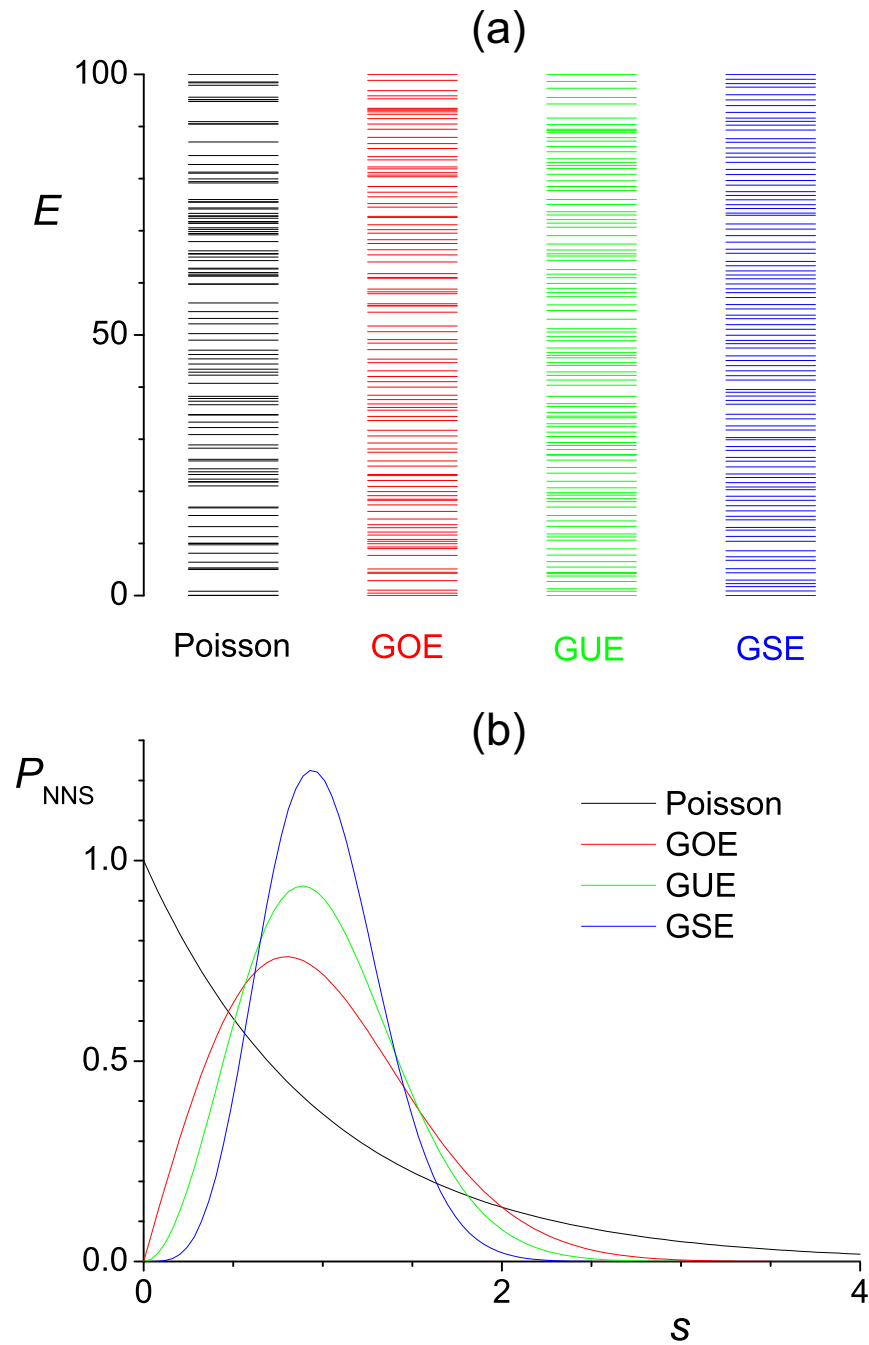
1.3.5 Smíšené systémy

Kromě zcela integrabilních systémů na jedné straně a zcela chaotických — ergodických — na straně druhé jsme v klasickém případě ukázali, že existují ještě systémy na pomezí

²⁵Toto tvrzení se označuje jako Bohigas' conjecture.

²⁶Toto tvrzení vlastně není protikladem k Bohigasově hypotéze, nýbrž jeho doplněním. V integrabilním systému je totiž každá hladina tvoří vlastní „skupinu“ popsanou jednoznačnou sadou kvantových čísel. Poissonovo rozdělení tedy získáme i v případě, když budeme dělat statistiku spekter chaotických systémů, ve kterých jsou smíchány hladiny s různými kvantovými čísly.

²⁷Pro systémy se dvěma stupni volnosti souvislost mezi integrabilitou a kvantovou dynamikou, ve které vzdálenosti sousedních hladin mají Poissonovo rozdělení, ukázal již Gutzwiller [Gut70].



Obrázek 1.10: Spektra (a) a hustoty pravděpodobnosti vzdáleností nejbližších sousedů (b) pro Poissonovo rozdělení a pro základní soubory náhodných matic GOE, GUE a GSE. Hladiny jsou transformovány tak, aby $E_0 = 0$ a aby střední vzdálenost mezi hladinami byla jednotková. Zobrazeno je 100 hladin pro každý soubor.

— KAM systémy. Jaká bude statistika vzdáleností nejbližších hladin odpovídajících kvantových smíšených systémů?

Teorie náhodných matic nedává žádný klíč k zodpovězení této otázky. Percival [Per73] ukazuje, že části spektra, odpovídající zbytkům torů, a části spektra egodických oblastí jsou statisticky nezávislé²⁸. Z toho vyplývá, že v sekvenci hladin jsou superponovány hladiny s Wignerovským rozdělením přes hladiny s Poissonovo rozdělením vzdáleností nejbližších sousedů. Na základě této myšlenky bylo navrženo *Berryho-Robnikovo rozdělení* [Ber84].

V praxi se však mnohem více ujalo *Brodyho rozdělení* [Bro73] (viz také snáze dostupná publikace [Bro81]), které interpoluje mezi rozdělením Poissonovým a Wignerovým pro GOE soubor. Má tvar

$$P_B(s; \omega) = (\omega + 1) \mathcal{N}_\omega s^\omega e^{-\mathcal{N}_\omega s^{\omega+1}} \quad (1.58)$$

$$\mathcal{N}_\omega \equiv \left[\Gamma \left(\frac{\omega + 2}{\omega + 1} \right) \right]^{\omega+1},$$

kde ω je parametr nabývající hodnot mezi $\omega = 0$ (pak rozdělení přesně odpovídá Poissonovu) a $\omega = 1$ (kdy dostáváme rozdělení Wignerovo). \mathcal{N}_ω je normalizační faktor a Γ je Eulerova gamma funkce. Jako ilustrace je zde uveden obrázek 1.11, kde je pro několik Brodyho parametrů znázorněna odpovídající množina hladin. Se vzrůstající hodnotou Brodyho parametru mizí shluky hladin (postupně narůstá interakce mezi hladinami).

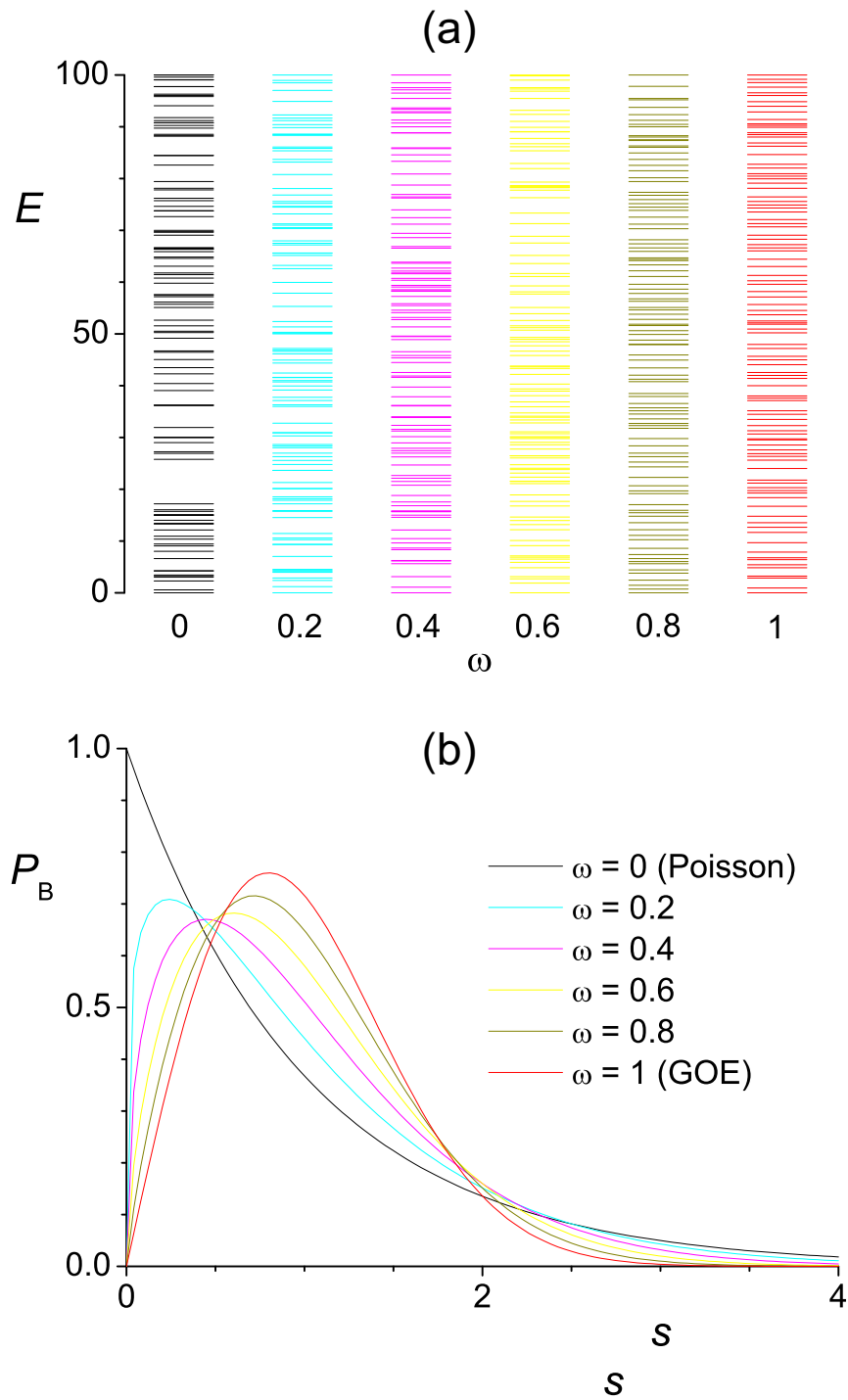
Brodyho interpolace mezi Poissonovým a Wignerovým rozdělením je uměle zavedená bez jakékoliv fyzikální motivace. Vykazuje vlastnosti, které nesouhlasí se známými teoretickými závěry pro vzdálenosti sousedních hladin spektra smíšeného systému. Jmenovitě se jedná například o asymptotiku $P_B(s \sim 0; \omega) \sim s^\omega$. Tyto vlastnosti lépe popisuje zmiňované Berryho-Robnikovo rozdělení²⁹ (teoretické i numerické srovnání Brodyho a Berryho-Robnikova rozdělení a aplikace druhého z nich nabízejí články [Pro94, Pro98, Pro99]). Na druhou stranu existují práce, které ukazují, že se jedná minimálně o velmi dobrou aproximaci [Che90], která fenomenologicky správně vystihuje například vztah mezi rozdílnými momenty tohoto rozdělení.

Brodyho parametr tedy tvoří „míru“ chaotičnosti kvantového systému a může být použit (či lépe jeho doplněk $1 - \omega$) k přímému srovnání s klasickou regulární částí fázového prostoru f_{reg} (1.27). Nelze očekávat přesnou kvantitativní shodu (už jen s ohledem na neurčitost v metodě výpočtu f_{reg} , popisovanou v části 1.2.5). Kvalitativní shoda byla pozorována, nebo o ní lze usuzovat na základě prací studujících smíšenou dynamiku například na Robnikově biliáru [Rob84, Gom05], dalších biliárdech [Cso94, Li02] nebo na systému vázaných oscilátorů [Hal84, Zim86]. Tyto systémy obsahují vnější nastavitelný parametr, jehož změnami lze postupně monotónně přecházet mezi integrabilním a zcela chaotickým případem. Tomu, jak je ukázáno, odpovídá monotónní změna parametru ω .

Pokud máme u zkoumaného systému k dispozici vzdálenosti nejbližších hladin s_i s Brodyho rozdělením s parametrem ω a hledáme-li tento parametr, výhodnější než

²⁸Podle úvah předchozích částí toto znamená, že hladinám, které odpovídají zbytkům torů, by bylo možno přiřadit jakási „přibližná“ kvantová čísla.

²⁹Kromě Berryho-Robnikova rozdělení bylo na základě jiných teoretických východisek ještě zkonstruováno Caurierovo-Grammaticosovo-Ramaniho rozdělení [Cau90] a Lenzovo-Haakeho rozdělení [Len91], obě však pouze pro matice velikosti 2×2 . Srovnáním všech těchto rozdělení (včetně rozdělení Brodyho) na modelu vázaného izotropního oscilátoru se zabývá práce [Bar99].



Obrázek 1.11: Spektra (a) a hustota pravděpodobnosti vzdáleností nejbližších sousedů (b) pro Brodyho rozdělení s různými parametry ω . Hladiny jsou transformovány stejně jako na obrázku 1.10. Příklad $\omega = 0$ odpovídá Poissonovu rozdělení, $\omega = 1$ Wignerovu rozdělení.

hustotu pravděpodobnosti (1.58) se ukazuje použít distribuční funkci Brodyho rozdělení

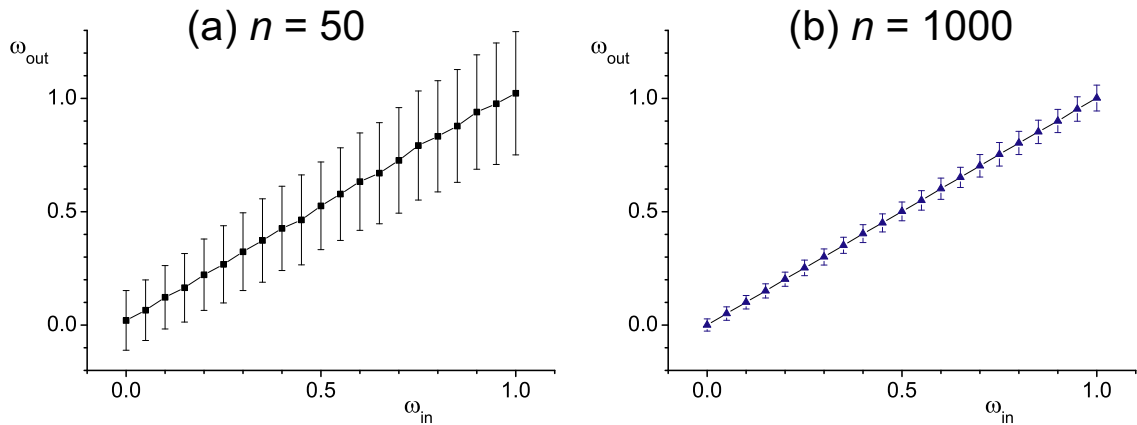
$$R_B(s; \omega) \equiv \int_0^s P_B(s'; \omega) ds' = 1 - e^{-\mathcal{N}_\omega s^{\omega+1}}. \quad (1.59)$$

Tu můžeme odhadnout veličinou

$$\hat{R}_B(s) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \theta(s - s_i), \quad (1.60)$$

kde n je celkový počet vzdáleností s_i . Pomocí tohoto odhadu určíme parametr ω χ^2 fitováním³⁰.

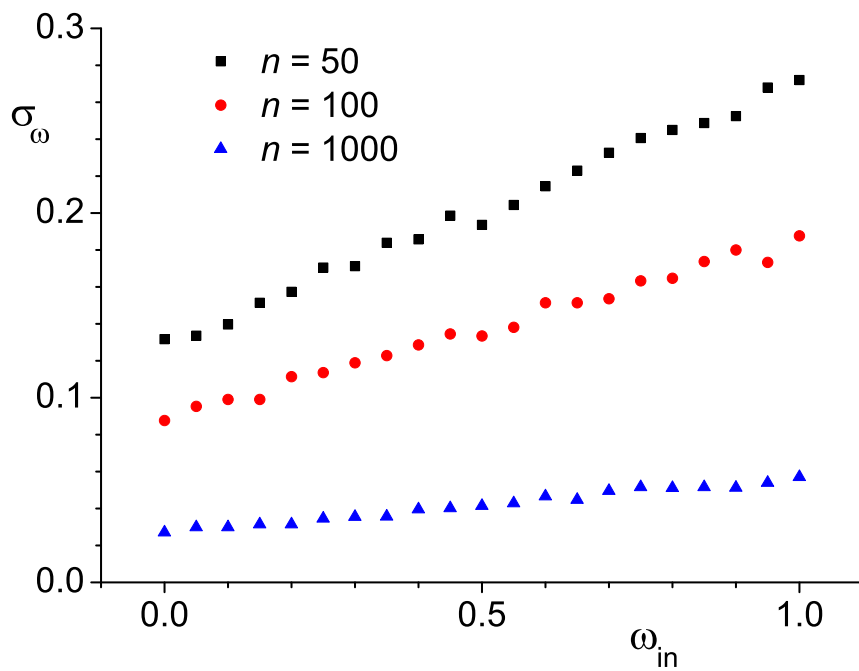
Důležitým bodem je otázka chyb, která v literatuře bývá často opomíjena. Směrodatná odchylka Brodyho parametru σ_ω totiž může být velká i při relativně dobré statistice s_i . My jsme se pokusili chybu odhadnout a využili k tomu postup opírající se o generování souboru hodnot se známým Brodyho parametrem ω_{in} a následným zpracováním χ^2 fitem (tzv. metoda vstupně-výstupní funkce). Generování a fitování jsme mnohokrát opakovali, čímž jsme mohli určit jednak střední hodnotu fitovaných $\bar{\omega}_{\text{out}}$, jednak závislost směrodatných odchylek na Brodyho parametru $\sigma_\omega(\omega)$. Střední hodnota $\bar{\omega}_{\text{out}}$ by se měla limitně přibližovat vstupní hodnotě ω_{in} , což je splněno, jak pozorujeme na obrázku 1.12. Směrodatná odchylka roste s velikostí Brodyho parametru, přičemž pro Wignerovský případ $\omega = 1$ je přibližně dvojnásobná než pro Poissonovský $\omega = 0$, viz také obrázek 1.13, kde je velikost směrodatných odchylek zobrazena pro různé velikosti souborů. Při malé statistice $n = 50$ hodnot je směrodatná odchylka až 0.3. Výpočty v geometrickém kolektivním modelu, jejichž výsledky budou uvedeny v další kapitole v části 2.3.4, byly počítány s $n = 1000$, kdy je směrodatná odchylka zhruba desetkrát menší³¹.



Obrázek 1.12: Vstupně-výstupní funkce pro Brodyho rozdělení v případě statistického souboru o $n = 50$ a $n = 1000$ hladinách. Rozdělení bylo generováno a následně zpracováno pro každý bod grafů 1000-krát, čímž byly získány střední hodnoty a směrodatné odchylky.

³⁰Odlíšná metoda, využívající speciální transformaci, po které stačí fitovat lineární závislost, je popsána v příloze IV.

³¹Metoda vstupně-výstupní funkce předpokládá, že vstupní hodnoty mají Brodyho rozdělení. To obecně nemusí být splněno, a tudíž skutečná směrodatná odchylka bude vyšší než $\sigma_\omega(\omega)$.



Obrázek 1.13: Závislost směrodatné odchyly při fitování Brodyho parametru pro různé velikosti statistických souborů. Při aproximaci lineární regresí je $\sigma_{\omega}^{(n=50)}(\omega) = 0.14\omega + 0.13$, $\sigma_{\omega}^{(n=100)}(\omega) = 0.096\omega + 0.089$ a $\sigma_{\omega}^{(n=1000)}(\omega) = 0.029\omega + 0.027$. Obrázek koresponduje s předchozím obrázkem 1.12.

1.3.6 Dlouhodobé korelace

Mezi další statistiky, používané v teorii náhodných matic a v teorii kvantového chaosu, patří ty, které popisují dalekodosahové korelace ve spektrech. Narozdíl od NNS statistiky, která zachycuje pouze korelace mezi sousedními hladinami, jsou dalekodosahové korelace „citlivějším“ nástrojem umožňujícím objevit odchylky experimentů či numerických modelů od teoretických předpovědí, které NNS nerozliší³².

Naším účelem bylo zavést spektrální statistiky k tomu, abychom byli schopni kvantifikovat množství chaosu ve smíšených systémech, ve kterých spolu chaos a regularita navzájem soupeří o své místo. K tomu nám dobře poslouží již rozdělení NNS, umožňující zavést míru pomocí Brodyho parametru ω . Rozšíření na dlouhodobé korelace (což v sobě zahrnuje i nalezení statistiky, která, podobně jako Brodyho rozdělení v případě NNS, interpoluje mezi regulárním a chaotickým případem) může být předmětem budoucí práce. Zde se dalekodosahovým korelacím nebudeme podrobně věnovat.

Zmíňme však alespoň nejpoužívanější statistiky, používané k popisu dalekodosahových korelací. Patří mezi ně tzv. *number variance* Σ^2 a Δ_3 *statistika*, někdy nazývaná také statistika nejmenších čtverců³³. Méně často se používají například F -statistika nebo Λ -statistika, užitečné zejména při zpracování experimentálních hodnot, neboť umožňují detekovat chybějící nebo naopak nadbytečné hladiny ve zpracovávaném spektru. Více o dalekodosahových interakcích pojednávají [Bro81, Meh04].

1.3.7 $1/f$ šum

Poslední statistická metoda, kterou uvedeme a která byla navržena teprve nedávno ke studiu kvantového chaosu, vychází z charakteristických vlastností šumu ve fluktuacích vzdáleností nejbližších hladin. Základy metody, její teoretické odvození a numerické studie jsou vyloženy ve člancích [Rel02, Fal04, Gom05]. Další aplikace ukazují práce [San05, Rel06]³⁴.

Metoda vychází ze standardních postupů analýzy časových řad. Pro unfoldované spektrum E'_i , viz (1.47), vypočítáme vzdálenost sousedních hladin s_i a na jejím základě zavedeme časovou řadu

$$\delta_k \equiv \sum_{i=1}^k (s_i - \langle s \rangle) \quad k = 1, \dots, n. \quad (1.61)$$

Jelikož po unfoldingu platí $\langle s \rangle = 1$, je výraz roven

$$\delta_k = E'_{k+1} - E'_1 - k. \quad (1.62)$$

Pro tuto řadu napočítáme pomocí Fourierovy transformace její frekvenční spektrum a druhou mocninu velikosti amplitud jednotlivých frekvencí (výkonové spektrum)

$$S(f) = \left| \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_k \delta_k e^{-\frac{2\pi i f k}{n}} \right|^2. \quad (1.63)$$

³²Umožňují také mnohem významněji rozlišit spektra příslušející různým souborům náhodných matic, například spektra souboru GOE od GUE.

³³Least square statistics; název vychází z metody jejího výpočtu.

³⁴Metoda byla doposud zkoušena na nejjednodušších systémech kvantového chaosu — Robnikův biliárd, vázané kvartické oscilátory.

Dostáváme se k hlavnímu tvrzení, které zní: Po vystředování přes soubor časových řad má frekvenční závislost amplitud jednoduchý vztah

$$\langle S(f) \rangle \sim \frac{1}{f^\alpha}, \quad (1.64)$$

kde

- $\alpha = 1$ pro soubory vlastních hodnot náhodných matic ze souborů GOE, GUE, GSE.
- $\alpha = 2$ pro soubory vlastních hodnot odpovídající systémům regulárním.
- $\alpha \in (1, 2)$ pro systémy smíšené.

Exponent α (přesněji hodnota $\alpha - 1$) tedy opět nabízí možnost přímého srovnání s výše zavednými mírami f_{reg} (1.27) a $1 - \omega$ (1.58).

Pro Robnikův biliárd byla analýza provedena v článku [Gom05] a byl nalezen kvalitativní souhlas všech tří veličin. Jelikož spektrum biliárdů má stejné chaotické vlastnosti v kterékoliv jeho části, lze v nich dobře provést středování (1.64). V systémech, v nichž chaotičita závisí na energii, však středování provést nelze. Zůstává nám tím pádem pouze jeden soubor $S(f)$ umožňující exponent α vypočítat. Statistická chyba takového výpočtu je však enormní a snižuje v těchto případech použitelnost metody, jak ukážeme později na případu GCM v části 2.3.5.

$1/f$ šum ve spektrálních fluktuacích rozšiřuje množinu charakteristických vlastností souborů kvantových hladin, mezi něž již dlouhou dobu patří výše zmíněné odpuzování hladin a korelace mezi nimi. Je pozoruhodné, že $1/f$ šum se vyskytuje v mnoha dalších systémech uvnitř i vně fyziky (objevuje se například při zkoumání dopravy, fluktuací tlukotu srdce, ale i vyzářování kvasarů) [Man99]. Pravděpodobně se jedná o fundamentální vlastnost chaotických systémů, jejíž původ však doposud nebyl odhalen.

1.3.8 Peresova metoda

Na závěr této kapitoly popíšeme neužívanou metodu vizualizace kvantového chaosu, kterou navrhl A. Peres [Per84a] a je také popsána v monografii [Rei92]. Této metodě se podrobně věnuje příloha V, zde bude proto zmíněna pouze ve stručnosti. Rovněž v práci [Hru08] lze nalézt další informace.

Omezíme se na chvíli na systémy se dvěma stupni volnosti. Pro integrabilní systém s Hamiltoniánem \hat{H} a s integrálem pohybu \hat{P} , $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ lze nalézt spektrum ve tvaru

$$\begin{aligned} \hat{H}|i\rangle &= E_i|i\rangle \\ \hat{P}|i\rangle &= P_i|i\rangle, \end{aligned} \quad (1.65)$$

kde E_i a P_i jsou vlastní hodnoty odpovídajících operátorů a $|i\rangle$ příslušné vlastní vektory. Na základě Einsteinova-Brillouinova-Kellerova (EBK) kvantování Peres ukázal, že pokud sestrojíme graf, do něhož vyneseme body o souřadnicích (E_i, P_i) , budou tvořit mříž s pravidelnou strukturou, na globálním měřítku pouze spojitě deformovanou.

Uvažujme nyní pozorovatelnou \hat{Q} , která není integrálem pohybu, $[\hat{H}, \hat{Q}] \neq 0$. Pro ni můžeme v Heisenbergově obraze zavést časově vystředovaný operátor

$$\hat{\hat{Q}} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \hat{Q}_H(t) dt. \quad (1.66)$$

Tento operátor je diagonální v energii (komutuje s Hamiltoniánem) a je tudíž novým integrálem pohybu platí pro něj

$$\begin{aligned}\langle i|\hat{Q}|j\rangle &= 0, & i \neq j \\ \langle i|\hat{Q}|i\rangle &= \langle i|\hat{Q}|i\rangle \equiv \langle \hat{Q}\rangle_i.\end{aligned}\tag{1.67}$$

Znovu můžeme vybudovat mříž bodů, tentokrát o souřadnicích $(E_i, \langle \hat{Q}\rangle_i)$. Pro rozumné operátory \hat{Q} bude mít opět tvar pravidelné mříže, jen jinak deformovanou než v případě operátoru P . Operátor \hat{Q} jsme mohli zvolit zcela libovolně.

Jak postupovat u neintegrabilních systémů? Mezičlánek mezi integrabilním a neintegrabilním případem tvoří právě operátor \hat{Q} , který zůstává konstantou pohybu i u systémů, u kterých „Pravý“ integrál pohybu neexistuje. Mříž bodů $(E_i, \langle \hat{Q}\rangle_i)$ však pro neintegrabilní systémy nebude regulární. Může obsahovat regulární ostrovy, odpovídající podle Percivalova teorému [Per73] zbytkům klasických torů, zbytek mříže bude chaotický. Percivalův teorém také zaručí, že rozdělení hladin mezi regulární ostrovy a chaotické moře bude nezávislé na volbě operátoru \hat{Q} .

Může ovšem nastat situace, kdy bude nějaký ostrov „zalit“ hladinami odpovídajícími chaotickým oblastem; regulární a chaotická mříž se přeloží přes sebe, což znemožní regulární vzor nalézt a identifikovat. Narozdíl od klasické metody Poincarého řezů zde tedy neexistují ostré hranice mezi regularitou a chaosem. Tato nevýhoda je kompenzována možností volit různé operátory \hat{Q} . Co je skryto na jedné mříži, může být odhaleno na jiné.

Metodu Peresových mříží lze připodobnit ke kvantové verzi klasické metody Poincarého řezů. Obě metody umožňují vizualizovat chaoticitu a na základě obrázku oddělit části regulární a chaotické. Zatímco v případě klasické dynamiky jsme takto mohli třídit trajektorie, v případě kvantovém můžeme separovat skupiny regulárních a chaotických hladin. Peresovy mříže jsme definovali pro systémy s dvěma stupni volnosti, avšak bez dalších změn je lze použít i v případě systémů vícerozměrných.

Peresova metoda neurčuje průměrné vlastnosti jako v případě spektrálních statistik. Každá hladina je v mříži zastoupena individuálně. Operátor \hat{Q} můžeme volit tak, abychom mohli pozorovat rozmanité strukturní změny kvantového systému například v závislosti na vnějších parametrech.

Doposud byl pomocí Peresových mříží podrobně studován pouze systém biliáru [Ree99] a dvouspinový systém v magnetickém poli [Rob98]³⁵. Zatímco biliárdy mají triviální závislost dynamického chování na energii, systém geometrického kolektivního modelu, který pomocí Peresovy metody studujeme my, má naopak bohatou závislost na energii a na vnějším parametru. Peresovy mříže v něm poskytují vynikající pohled do kvantověmechanického dění.

³⁵V těchto pracích je mříž nazývána *kvantová síť* (quantum web).

Kapitola 2

Geometrický kolektivní model

V této kapitole popíšeme základy geometrického kolektivního modelu (GCM)¹, a to jak v jeho známější kvantové verzi, tak v jeho verzi klasické. Model nebudeme studovat v celé jeho obecnosti, nýbrž omezíme se pouze případ s nulovým momentem hybnosti. Takto redukovaný systém má pouze dva (vibrační) stupně volnosti. To znamená, že k zobrazení a měření jeho chaotických vlastností lze dobře použít v klasickém případě metody Poincarého řezů a na ní založené techniky výpočtu regulární části fázového prostoru f_{reg} , v kvantovém případě pak metodu Peresových mříží.

Míra chaotičnosti kvantových systémů a souvislosti projevů chaosu v klasické a kvantové dynamice byly doposud studovány převážně v systémech biliárdů [Rob84, Cso94, Li02], vázaného kvartického oscilátoru [Hal84, Zim86] nebo Hénon-Heilesova systému. Tyto systémy mají určité specifické vlastnosti. Dynamika biliárdů nezávisí na energii, míra jejich chaotičnosti je stejná pro celé spektrum či pro jakýkoliv jeho úsek. U vázaných oscilátorů sice chaotičnost závisí na energii, avšak díky homogenitě potenciálu ji lze stejně dobře popsat změnami vnějšího parametru (energie a vnější parametr jsou na sobě navzájem závislé). Geometrický kolektivní model poskytuje dostatečně komplexní, a přitom stále jednoduchý nástroj k důkladnému prozkoumání vztahů klasického a kvantového chaosu. Charakter jeho dynamiky totiž závisí jak na energii, tak na vnějším parametru. Mimo to nabízí možnost studovat přechod od integrabilní dynamiky k neintegrabilní a také dění v okolí fázových přechodů.

Klasickému řešení GCM se široce věnovala diplomová práce [Str04]. Její výsledky shrnují a rozšiřují články publikované v recenzovaných pracích [Cej04, Str06, Str07], které jsou přetištěny v přílohách I, II, III a navzájem se doplňují s textem této kapitoly. Zde tyto výsledky rozšíříme o další, které zatím publikované nebyly. Kvantový chaos a srovnání měř chaosu v klasickém a kvantovém případě jsou podrobně zpracovány v časopiseckých publikacích [Str09a, Str09b], které tvoří obsah příloh IV a V a které jsou rovněž neoddelitelně spjaty textem prezentovaným v této kapitole. Kromě zmiňovaných článků byly výsledky publikovány v těchto pracích: [Cej09a, Mac09, Cej06, Str09c].

¹Geometric collective model. Původní Bohrova verze a její rozpracování, které bylo provedeno v 60. letech 20. století, se nazývaly *geometrický model*. Jeho rozšíření, navržené v pracích G. Gneusse, U. Mosela a W. Greinera [Gne69, Gne70a, Gne70b], požívají termín *kolektivní model*. Později došlo k syntéze těchto dvou pojmů. Oba přívlasky totiž dobře vystihují fyzikální podstatu modelu. My budeme používat název *geometrický kolektivní model* pro celou třídu modelů, které vycházejí z původní Bohrovy verze a navzájem se od sebe liší převážně použitým potenciálem. V užším významu budeme pod tímto označením chápat naši konkrétní verzi modelu, od které se odvíjejí všechny výsledky této práce.

Kapitola je členěna následujícím způsobem. V první části 2.1 popíšeme obecné základy modelu. Druhá část 2.2 se bude zabývat klasickou dynamikou modelu, ukáže aplikace geometrické metody pro GCM model a vyvrcholí souhrnnou kompletní mapou klasického chaosu. Část bude zakončena popisem možných rozšíření geometrického kolektivního modelu.

V druhé části se obrátíme ke kvantové verzi GCM. Zavedeme dvě odlišná kvantování modelu. Poté budeme podrobně diskutovat numerické aspekty diagonalizace Hamiltonovy matice v příslušné bázi a ukážeme metodu, která nám umožní rozhodnout, jak velká část ze všech vlastních hodnot této matice dobře popisuje spektrum. Z vypočítaného spektra určíme závislost doplňku Brodyho parametru $1 - \omega$ na energii a srovnáme ji se závislostí $f_{\text{reg}}(E)$. Stejně budeme postupovat i v případě parametru α metody $1/f$ šumu. Na závěr této části ukážeme kompletní přehled Peresových mříží pro všechny možné konfigurace systému pro dva různé Peresovy operátory.

Pro podrobnější seznámení s geometrickým kolektivním modelem poslouží jednak klasická monografie [Boh98], jednak další knihy [Eis70, Gre96]. V nich je uvedeno fyzikální pozadí modelu a spousta technických detailů. Poslouží také nedávno publikovaný přehledný článek [For05] pojednávající o analytických řešeních geometrického modelu pro různé typy potenciálů. Odvození mnoha vztahů je podrobně provedeno v diplomové práci [Hru08].

2.1 Základy modelu

Geometrický kolektivní model jaderné dynamiky byl navržen A. Bohrem. Ačkoliv od té doby byla vyvinuta řada mikroskopických technik popisu atomových jader, geometrický model spolu s koncepčně příbuzným modelem interagujících bosonů [Iac87], zůstává důležitým nástrojem fenomenologických analýz. Příkladem provázání sofistikovaného mikroskopického popisu jádra s geometrickým modelem je práce [Nik09].

V GCM souvisejí kolektivní módy pohybu jaderné hmoty (rotace a vibrace) s jadernými excitacemi. Tvar jádra je dán rozvojem jeho poloměru do kulových funkcí

$$R = R_0 \left(1 + \sum_{\lambda\mu} \alpha_{\mu}^{\lambda*} Y_{\mu}^{\lambda} \right) \quad \begin{array}{l} \lambda = 0, 1, \dots \\ \mu = -\lambda, \dots, \lambda \end{array} \quad (2.1)$$

přičemž geometrický kolektivní model bere v úvahu pouze kvadrupólové stupně volnosti $\lambda = 2^2$. Ty popisují nejjednodušší netriviální pohyb, uvážíme-li, že (i) monopólové deformace $\lambda = 0$ souvisejí s pulsováním objemu, které jsou nulové za předpokladu zanedbatelné stlačitelnosti jaderné hmoty, a (ii) dipólové deformace $\lambda = 1$ spojené s kmitáním těžiště lze odtransformovat přechodem do těžišťové soustavy.

Bohrův Hamiltonián zní

$$\begin{aligned} H &= T + V = \\ &= \frac{\sqrt{5}}{2K} [\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi}]^{(0)} + \sqrt{5} A [\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha}]^{(0)}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

²Z tohoto důvodu budeme v nadále index λ vynechávat.

kde α_μ , $\mu = -2, \dots, 2$ jsou složky kvadrupólového tenzoru deformací (zobecněných souřadnic našeho modelu) splňující

$$\alpha_\mu = (-1)^\mu \alpha_{-\mu}^*. \quad (2.3)$$

a π_μ jsou kanonicky přidružené hybnosti. Veličiny K , A jsou vnější parametry, přičemž K má význam efektivní hmotnosti a A představuje „tuhost“ (potenciální člen má charakter potenciálu harmonického oscilátoru). Tenzor α se skládá z pěti nezávislých reálných dynamických proměnných. Separujeme-li rotační a vibrační stupně volnosti, můžeme za tyto dynamické proměnné volit tři Eulerovy úhly $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$, které udávají natočení v prostoru. Zbývající dvě, jež se značí (β, γ) , pak určují deformace ve vlastní souřadné soustavě spojené s hlavními osami jádra, přičemž β udává velikost deformace ($\beta = 0$ odpovídá sférickému tvaru), γ souvisí s typem tvaru (speciální případy tvoří axiálně symetrický tvar protáhlý pro $\gamma = 2\pi k/3$ a zploštělý³ $\gamma = \pi(2k + 1)/3$).

Relace, která spojuje parametry deformace (β, γ) se složkami kvadrupólového tenzoru $\alpha^{(1)}$ vyjádřenými ve vlastní souřadné soustavě, zní

$$\begin{aligned} x &\equiv \beta \cos \gamma = \alpha_0^{(1)} \\ y &\equiv \beta \sin \gamma = \sqrt{2} \alpha_{\pm 2}^{(1)}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Souřadnice (x, y) , které budeme v dalším textu nejvíce používat, jsou kartézským vyjádřením polárních souřadnic (β, γ) .

Přechod do vnitřní soustavy však není jednoznačný. Existuje celkem 24 navzájem ekvivalentních možných popisů jedné fyzikální konfigurace [Gre96]. Z toho vyplývá, že jak Hamiltonián, tak samotná jeho řešení budou vykazovat určité diskrétní symetrie. Nezávislý je pouze sextant

$$\beta \in (0, \infty) \quad \gamma \in (0, \pi/3) \quad (2.5)$$

a řešení pro celou rovinu získáme zobrazením sextantu na celou rovinu užitím symetrií

$$\gamma \leftrightarrow -\gamma \quad \gamma \leftrightarrow \gamma + \frac{2\pi}{3}. \quad (2.6)$$

Jak již bylo naznačeno, Hamiltonián (2.2) popisuje kmity pětirozměrného harmonického oscilátoru (dynamická grupa symetrie obecného N -rozměrného harmonického oscilátoru je $U(N)$, neboli Bohrovův Hamiltonián má grupu symetrie $U(5)$). Potenciál je symetrický vůči rotacím okolo úhlu γ a má minimum v počátku souřadnic $\beta = 0$. Dokáže tedy popsat pouze sférické jádro.

Aby bylo možné modelem popsat širší třídu jader (například deformovaná jádra, která jednoduchým Bohrovým modelem 2.2 popsat nelze), rozšířili jej ve své práci G. Gneuss, U. Mosel, W. Greiner [Gne69, Gne70a, Gne70b] o další skalární členy, a to jak v potenciálu, tak v kinetickém členu (tím také přibyly do modelu další parametry, které bylo možné nastavit tak, aby model lépe souhlasil s experimentálními spektry). My jejich rozšíření převezmeme. Nikoliv však v plném znění, nýbrž omezíme se pouze na nejjednodušší kinetický člen, který je shodný s kinetickým členem T Bohrova Hamiltoniánu

³Prolate, oblate.

(2.2), a na tři nejnižší členy v potenciálu⁴

$$V = \sqrt{5} A [\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha}]^{(0)} - \sqrt{\frac{35}{2}} B \left[[\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha}]^{(2)} \times \boldsymbol{\alpha} \right]^{(0)} + 5 C \left([\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha}]^{(0)} \right)^2 \quad (2.8)$$

(B , C jsou libovolné parametry, přičemž C se volí kladné, aby bylo zaručeno, že je systém vázaný). Ve vnitřní souřadné soustavě má potenciál tvar

$$\begin{aligned} V &= A\beta^2 + B\beta^3 \cos 3\gamma + C\beta^4 = \\ &= A(x^2 + y^2) + B(x^3 - 3xy^2) + C(x^2 + y^2)^2. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Pokud budeme v dalším zmiňovat geometrický kolektivní model (GCM), budeme mít vždy na mysli systém s tímto potenciálem.

Hamiltonián GCM tedy obsahuje celkem čtyři parametry (A, B, C, K). V příloze II je ukázáno, že klasické verzi systému závisí jeho kvalitativní chování pouze na jediném parametru

$$\tau \equiv \frac{AC}{B^2} \quad (2.10)$$

determinujícím typ rovnovážného tvaru jádra (poměr vlastních čísel tenzoru deformace $\boldsymbol{\alpha}$). Tento závěr vyplývá z možnosti provést na systému 3 nezávislé škálové transformace, které nemění dynamické vlastnosti a relativní charakteristiky rovnovážného řešení. V kvantovém případě se k němu ještě přidává druhý parametr

$$\kappa \equiv \frac{\hbar^2}{K}, \quad (2.11)$$

vyplývající z dodatečné škály spojené s Planckovou konstantou (viz také [Cap03]).

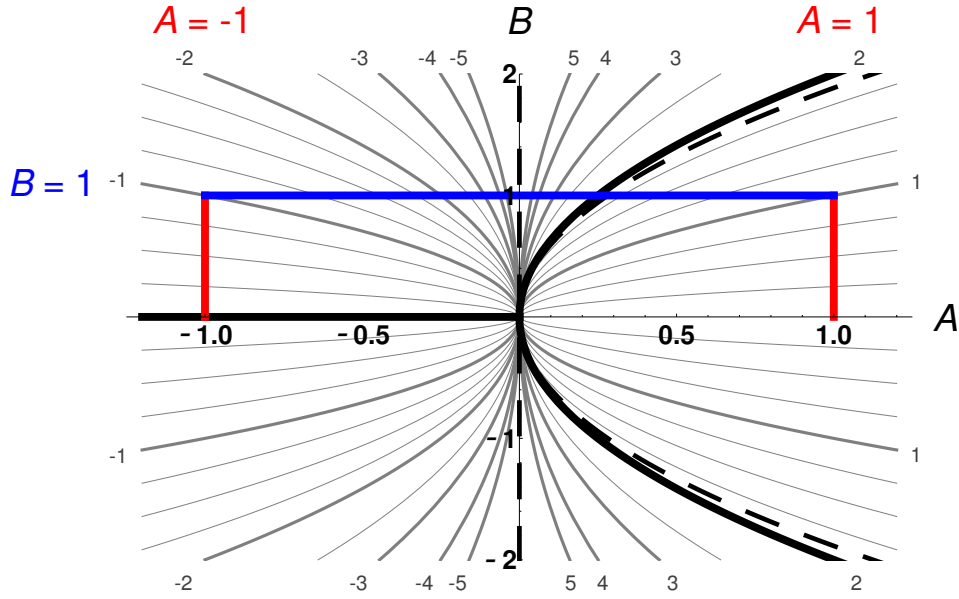
Na obrázku 2.1 je znázorněna fázová struktura geometrického modelu s potenciálem (2.9). Šedivě vyznačené paraboly $\tau = \text{konst.}$ (paraboloidy, pokud uvažujeme i třetí souřadnici parametrického prostoru odpovídající parametru C) znázorňují množiny parametrů, které dávají škálově ekvivalentní Hamiltoniány. Silné černé čáry $A < 0$, $B = 0$ a $\tau = 1/4$ reprezentují fázový přechod od protáhlého ke zploštělému tvaru, resp. od deformovaného tvaru ke sférickému. Spinodální a antispinodální bod, které odpovídají fázovému přechodu pro $\tau = 1/4$ a které vymezují oblast fázové koexistence, jsou zobrazeny silnou černou přerušovanou čarou. O fázové struktuře GCM je více uvedeno v přílohách I, II a v pracích [Cej03, Str04].

Na fázovém diagramu je barevně znázorněna křivka, která protne všechny paraboly, a tedy popíše všechny možné konfigurace GCM systému. Červené čáry odpovídají škálování $A = \pm 1$ s proměnným parametrem B , modrá čára značí škálování $B = 1$ s proměnným A . Převážná část výsledků práce bude uvedena na této spojitě cestě parametrickým prostorem. Její explicitní vyjádření zní

$$\begin{aligned} A &= -1, B \in (0, 1) \\ A &\in (-1, 1), B = 1 \\ A &= 1, B \in (1, 0). \end{aligned} \quad (2.12)$$

⁴C. C. Noack ve svém článku[Noa68] ukazuje, že nejobecnější tvar potenciálu lze zapsat rozvojem, který obsahuje pouze mocniny dvou členů:

$$V = \sum_{i,j=0}^{\infty} C_{ij} \left([\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha}]^{(0)} \right)^i \left(\left[[\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha}]^{(2)} \times \boldsymbol{\alpha} \right]^{(0)} \right)^j. \quad (2.7)$$



Obrázek 2.1: Fázový diagram GCM pro $K = C = 1$. Šedivé čáry znázorňují „vrstevnice“, na kterých leží parametry (A, B) dávající ekvivalentní Hamiltoniány. Hodnoty u vrstevnic udávají hodnoty $\pm 1/\sqrt{|\tau|}$, jejichž znaménko odpovídá znaménku A . Černou silnou čarou jsou znázorněny oblasti fázového přechodu, přerušované čáry vymezují oblast fázové koexistence. Bod $A = B = 0$ je trojný bod.

Ve všech případech fixujeme $K = 1$, $C = 1$. Přechod od škálování $A = \pm 1$ s nastavitelným parametrem B a energií E_B ke škálování $B = 1$ s nastavitelným parametrem A s energií E_A umožňují následující vztahy:

$$\left\{ \begin{array}{c} A = \pm 1 \\ B \\ E_B \end{array} \right\} \longrightarrow \left\{ \begin{array}{c} A = \pm \frac{1}{B^2} \\ B = 1 \\ E_A = E_B B^4 \end{array} \right\}. \quad (2.13)$$

Pro obrácený přechod použijeme vztahy inverzní.

S fázovou strukturou souvisí polohy extrémů potenciálu $V(x, y)$. Omezíme se na studium extrémů na přímce $y = 0$. Jejich polohy získáme řešením rovnice

$$\left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{y=0} = 0. \quad (2.14)$$

Polohy ostatních extrémů, které jsou s (2.14) ekvivalentní díky symetriím (2.6), budou ležet na přímkách, jež získáme otočením přímky $y = 0$ v rovině (β, γ) o úhly $\pm 2\pi/3$. Rovnice (2.14) má kořeny

$$\begin{aligned} x_E^{(0)} &= 0 \\ x_E^{(1,2)} &= \frac{-3B \pm \sqrt{9B^2 - 32AC}}{8C}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

přičemž $x_E^{(1,2)}$ uspořádáme tak, aby

$$V(x_E^{(1)}) \leq V(x_E^{(2)}). \quad (2.16)$$

Významy kořenů jsou následující:

- Pro $\tau < 0$ udává $x_E^{(0)}$ polohu lokálního maxima v počátku soustavy souřadnic, $x_E^{(1)}$ globální minimum a $x_E^{(2)}$ sedlový bod (minimum v souřadnici x , avšak maximum v souřadnici y) potenciálu.
- Pro $0 \leq \tau < 1/4$ leží v $x_E^{(0)}$ lokální minimum, v $x_E^{(2)}$ lokální maximum a $x_E^{(1)}$ zůstává globální minimum potenciálu.
- Pro $\tau = 1/4$ nastává zmiňovaný fázový přechod. Minima v $x_E^{(0)}$ a $x_E^{(1)}$ jsou stejně hluboká.
- Pro $1/4 < \tau < 32/9$ je minimum $x_E^{(0)}$ hlubší než pro $x_E^{(1)}$. Obě minima stále odděluje lokální maximum v $x_E^{(2)}$.
- Pro $\tau \geq 32/9$ kořeny $x_E^{(1,2)}$ mizí. V potenciálu zůstává minimum v počátku $x_E^{(0)}$.
- Pro $B = 0$ a $A < 0$ má potenciál tvar mexického klobouku symetrického vůči otočení o úhel γ s lokálním maximem v bodě $x_E^{(0)}$, pro kladná A kladné v počátku jediný extrém potenciálu, globální minimum.

Na závěr uvedme malé shrnutí. Geometrický model má ve svém plném znění pět stupňů volnosti: tři rotační a dva vibrační. V této práci se budeme nadále věnovat pouze studiu vibračních stupňů volnosti. Na systém GCM budeme pohlížet jako na nerotující, jeho vnitřní soustava bude totožná se soustavou laboratorní a nebude-li řečeno jinak, budeme mít od této chvíle na mysli vždy tuto nerotující verzi.

Odseparování rotačních stupňů volnosti se podrobně věnuje jednak práce [Str04], jednak na ni navazující článek [Str06] přetištěný v příloze II, kde je navíc diskutován případ rotace kolem jedné pevné osy.

2.2 Klasická dynamika

Zde se budeme zabývat výsledky, která lze získat řešením klasických pohybových rovnic pro nerotující případ GCM Hamiltoniánu. Nejprve uvedeme pohybové rovnice a Jacobiho matici potřebnou pro výpočet deviací dané trajektorie metodou SALI. Poté nalezneme explicitní analytické vyjádření hranice, kde se podle geometrického techniky, popsané v části 1.2.6, začíná objevovat nestabilita. Nakonec zobrazíme kompletní mapu klasického chaosu v GCM pro všechny dostupné energie a hodnoty externích parametrů [při škálování podél cesty (2.12)].

2.2.1 Pohybové rovnice

Kinetický člen Hamiltoniánu geometrického kolektivního modelu (2.2) má pro nulové rotace stejný tvar jako pro volnou částici ve dvourozměrném prostoru

$$T = \frac{1}{2K} \left(p_\beta^2 + \frac{1}{\beta^2} p_\gamma^2 \right) = \frac{1}{2K} (p_x^2 + p_y^2), \quad (2.17)$$

potenciál je dán vztahem (2.9).

Hamiltonovy pohybové rovnice zní

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{p_x}{K} & \frac{dp_x}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial x} = -V_x \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_y} = \frac{p_y}{K} & \frac{dp_y}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial y} = -V_y, \end{aligned} \quad (2.18)$$

kde jsme označili

$$\begin{aligned} V_x &\equiv \frac{\partial V}{\partial x} = 2Ax + 3B(x^2 - y^2) + 4Cx(x^2 + y^2) \\ V_y &\equiv \frac{\partial V}{\partial y} = 2Ay - 6Bxy + 4Cy(x^2 + y^2). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Tyto rovnice integrujeme pomocí Runge-Kuttovy metody 4. řádu. Detaily integrace byly diskutovány již v práci [Str04].

2.2.2 Výpočet f_{reg}

Nerotující GCM model má pouze dva stupně volnosti, takže regulární část fázového prostoru f_{reg} můžeme počítat metodou kombinující Poincarého řezy a metodu SALI, viz část 1.2.5. Metoda SALI vyžaduje znalost časového vývoje dvou nezávislých odchylek jedné trajektorie $\delta^{(1,2)}$. Abychom mohli odchylky pomocí rovnice (1.14) vypočítat, musíme znát složky Jacobiho matice J.

Pro obecný 2D systém má matice J formu

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \frac{\partial \mathbf{W}(x, y, p_x, p_y)}{\partial(x, y, p_x, p_y)} = \frac{\partial}{\partial(x, y, p_x, p_y)} \left(\frac{\partial H}{\partial p_x}, \frac{\partial H}{\partial p_y}, -\frac{\partial H}{\partial x}, -\frac{\partial H}{\partial y} \right) = \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 T}{\partial p_x \partial x} & \frac{\partial^2 T}{\partial p_x \partial y} & \frac{\partial^2 T}{\partial p_x \partial p_x} & \frac{\partial^2 T}{\partial p_x \partial p_y} \\ \frac{\partial^2 T}{\partial p_y \partial x} & \frac{\partial^2 T}{\partial p_y \partial y} & \frac{\partial^2 T}{\partial p_y \partial p_x} & \frac{\partial^2 T}{\partial p_y \partial p_y} \\ -\frac{\partial^2 T}{\partial x \partial x} - \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial x} & -\frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial y} & -\frac{\partial^2 T}{\partial x \partial p_x} & -\frac{\partial^2 T}{\partial x \partial p_y} \\ -\frac{\partial^2 T}{\partial y \partial x} - \frac{\partial V}{\partial^2 y \partial x} & -\frac{\partial^2 T}{\partial y \partial y} - \frac{\partial V}{\partial^2 y \partial y} & -\frac{\partial^2 T}{\partial y \partial p_x} & -\frac{\partial^2 T}{\partial y \partial p_y} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

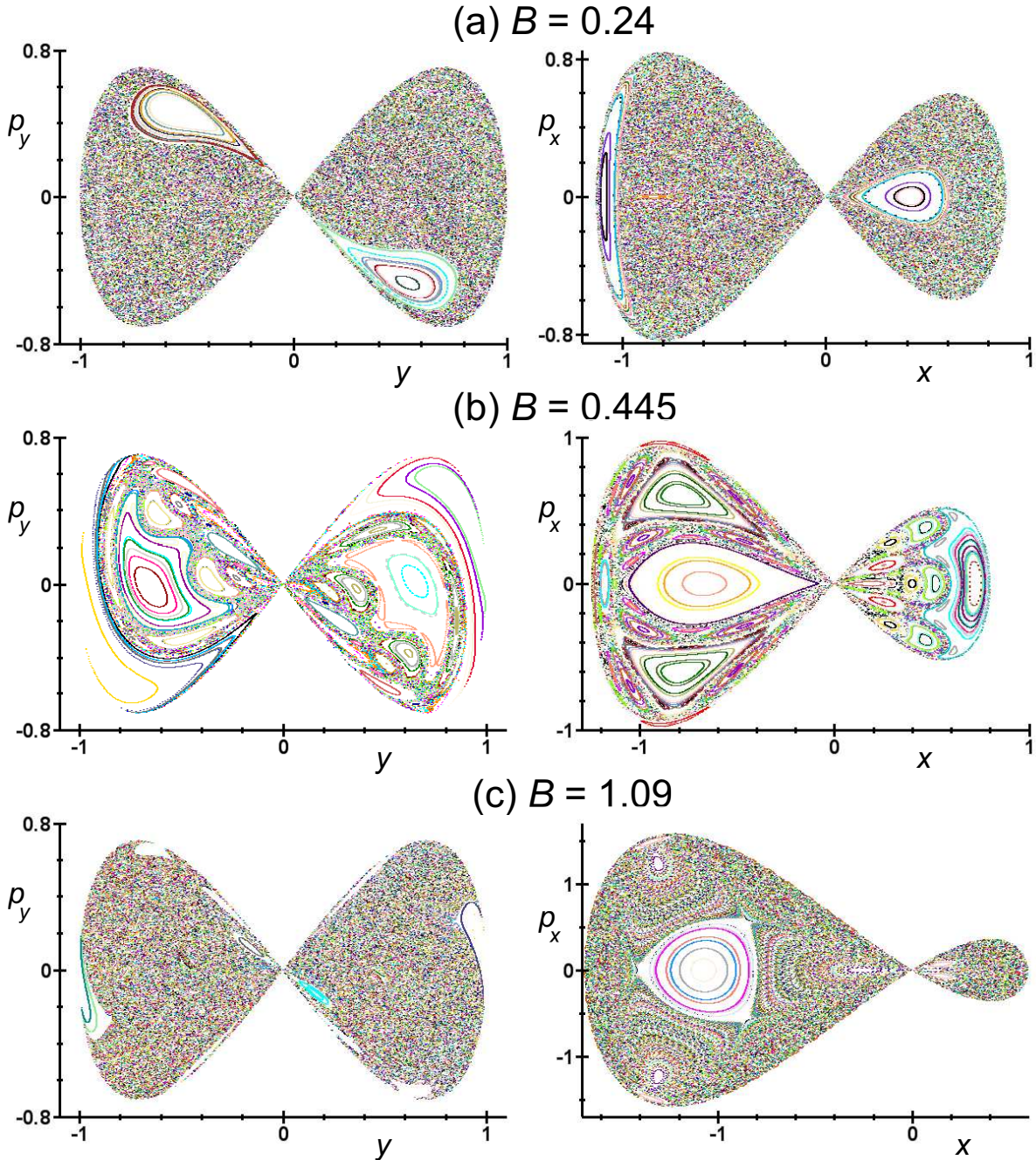
což případě Hamiltoniánu geometrického kolektivního modelu vede na jednoduchý tvar

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{K} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{K} \\ -V_{xx} & -V_{xy} & 0 & 0 \\ -V_{xy} & -V_{yy} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Zde jsme, analogickým způsobem jako u pohybových rovnic, označili derivace potenciálu

$$\begin{aligned} V_{xx} &\equiv \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial x} = 2A + 6Bx + 4C(3x^2 + y^2) \\ V_{xy} &\equiv \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial y} = (-6B + 8Cx)y \\ V_{yy} &\equiv \frac{\partial^2 V}{\partial y \partial y} = 2A - 6Bx + 4C(x^2 + 3y^2). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Při výpočtu f_{reg} používáme Poincarého řezy rovinou $y = 0$, přičemž za souřadnice řezu bereme (x, p_x) . Příklad tohoto řezu byl již uveden dříve na obrázku 1.4 (a). Pro ilustraci a srovnání jsme navíc zobrazili i řez rovinou $x = 0$, viz obrázek 1.5. Závislost f_{reg} na volbě řezu byla rovněž demonstrována na obrázku 1.7 pro energii $E = 0$. Na tomto obrázku bylo ukázáno, že závislost f_{reg} na typu řezu je velice slabá (avšak není nulová) a volba řezu nemění tvar průběhu závislosti regularity na vnějších parametrech.



Obrázek 2.2: Srovnání Poincarého řezů vedených rovinami $x = 0$ a $y = 0$ pro nerotující GCM systém s parametry $A = -1$, $C = 1$ a energií $E = 0$. Zobrazeno je 1000 průchodů rovinou řezu pro každou ze 100 trajektorií. Body se stejnou barvou v různých obrázcích neodpovídají týmž trajektoriím.

Pro detailnější ilustraci vzhledu řezů rozdílnými rovinami $x = 0$ a $y = 0$ jsou na

obrázku 2.2 zobrazeny Poincarého řezy pro další hodnoty parametrů GCM modelu. Všechny příklady bereme při nulové energii ve význačných bodech křivky $f_{\text{reg}}(B) \Big|_{A=-1}$.

- $B = 0.24$ tvoří první minimum, do kterého regularita monotónně klesá z integrabilního případu $B = 0$ při vzrůstající poruše B . Vezmeme-li v úvahu i jiné energie než $E = 0$, jedná se pro tuto hodnotu B o jeden z nejchaotičtějších případů GCM.
- $B = 0.445$ je jedno z lokálních maxim regularity před dosažením nejvýraznějšího maxima $B = 0.62$ (řezy pro maximum $B = 0.62$ zde neuvádíme, protože již byly zobrazeny na obrázcích 1.4 (a) a 1.5).
- $B = 1.09$ je výrazné lokální minimum regularity, nejhlubší minimum předtím, než začne regularita opět stoupat k limitní hodnotě $f_{\text{reg}} = 1$. Té by dosáhla v limitním případě $A = -1$, $B \rightarrow \infty$ [tento případ je v jiném škálování ekvivalentní hodnotám parametrů $A = 0$, $B = 1$, viz (2.13); v obou případech je samozřejmě $C = 1$].

Je patrné, že i přes rozdílné tvary řezů (a přes rozdílné tvary a umístění regulárních oblastí) je relativní zastoupení chaotických a regulárních částí stejné v obou typech řezů, přesně v souladu s výpočtem z obrázku 1.7.

Shrneme-li, budeme při výpočtu f_{reg} postupovat takto: Kinematicky dostupnou oblast zobrazované roviny řezu (x, p_x) vnoříme do mříže, jež je rozdělena ve všech výpočtech na 100×100 buněk. Poté provádíme algoritmus uvedený v sekci 1.2.5.

Stojí ještě za zmínku, že nerotující GCM systém je příbuzný se široce studovaným Hénon-Heilesovým systémem, zavedeným v práci [Hen64]. Hénon-Heilesův systém tvoří vlastně speciální případ GCM, který získáme volbou $C = 0$. Mezi články, které věnují studiu různých aspektů chaotické dynamiky a které se dotýkají této práce, patří například [Cer96, Sko04].

2.2.3 Regularita a chaos pomocí geometrické metody

V této části budeme aplikovat geometrickou metodu, kterou jsme zavedli v sekci 1.2.6, na systém geometrického kolektivního modelu. V případě nerotujícího GCM lze najít analytické vyjádření pro okamžik, kdy oblast záporných vlastních čísel matice \mathcal{V} (1.44) při změnách energie či parametrů modelu prvně pronikne do kinematicky dostupné oblasti. Podle geometrické metody by záporné hodnoty vlastních čísel uvnitř kinematicky dostupné oblasti měly do systému přinést nestabilitu a první chaotické trajektorie. V GCM modelu navíc ukážeme, že tento okamžik přesně koinciduje se změnou v hranici kinematicky dostupné oblasti: Původně zcela konvexní hranice začne obsahovat konkávní úseky⁵. Předpokládáme, že toto tvrzení mezi zápornými vlastními hodnotami $\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)}$ uvnitř kinematicky dostupné oblasti a zakřivením hranice platí obecně (podobné chování lze pozorovat i na obrázcích prací [Hor07, Zio07, Zio08] pro jiné modely než GCM).

⁵Konkavita hranice je také jednou z postačujících podmínek vzniku chaosu v systémech biliárdů.

Matice \mathcal{V} má podle svého definičního vztahu (1.44) v případě GCM systému složky

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{xx} &= \frac{1}{K} \left\{ \frac{3}{2|E-V|} [2Ax + 3B(x^2 - y^2) + 4Cx\beta^2]^2 + [2A + 6Bx + 4C(3x^2 + y^2)] \right\} \\ \mathcal{V}_{xy} &= \frac{1}{K} \left\{ \frac{3}{2|E-V|} [2Ax + 3B(x^2 - y^2) + 4Cx\beta^2] [2Ay - 6Bxy + 4Cy\beta^2] + \right. \\ &\quad \left. + y[-6B + 8Cx] \right\} \\ \mathcal{V}_{yx} &= \mathcal{V}_{xy} \\ \mathcal{V}_{yy} &= \frac{1}{K} \left\{ \frac{3}{2|E-V|} [2Ay - 6Bxy + 4Cy\beta^2]^2 + [2A - 6Bx + 4C(x^2 + 3y^2)] \right\} \end{aligned} \quad (2.23)$$

[využili jsme označení (2.19) a (2.22)]. Diagonalizací matice získáme v každém bodě prostoru dvě vlastní čísla $\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)} \leq \lambda_{\mathcal{V}}^{(2)}$, tudíž menší z vlastních hodnot $\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)}$ uvnitř kinematically dostupné oblasti indikuje přítomnost chaosu. Existenci záporné vlastní hodnoty v kinematically dostupné oblasti určíme následujícím postupem:

- Najdeme si hranici kinematically dostupné oblasti ∂K a hranici $\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)} = 0$, kterou označíme $\partial\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)}$.
- Záporné vlastní číslo leží uvnitř ∂K , pokud se obě hranice protínají nebo pokud hranice $\partial\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)}$ celá leží uvnitř kinematically dostupné oblasti.

Pro ilustraci metody je na obrázku 2.3 znázorněn průběh tvarů hranic ∂K (černě), $\partial\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)}$ (červeně) a $\partial\lambda_{\mathcal{V}}^{(2)}$ (modře) pro GCM s parametry $A = -1$, $B = 1.09$ a pro několik různých energií. Pro porovnání je na obrázku 2.4 znázorněna závislost f_{reg} na energii pro tytéž parametry modelu a v příloze II na obrázku 7 jsou nakresleny Poincarého řezy ze systému s ekvivalentními hodnotami parametrů, avšak ve škálování s $B = 1$ s $A = 0.84$ [k přepočítání energií lze použít vztahy (2.13)].

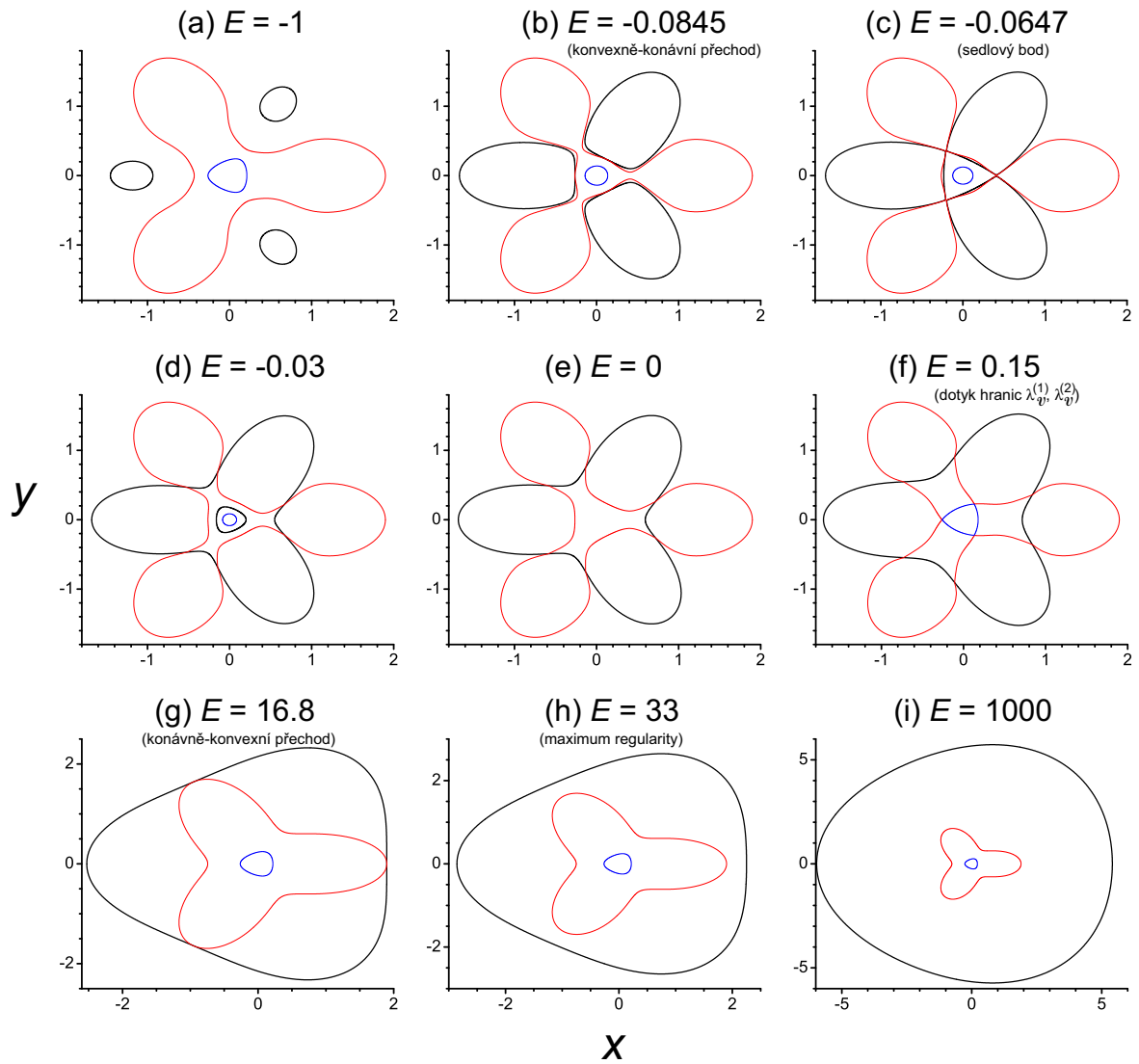
Na panelu (a) obrázku 2.3 vidíme, že pro energie velmi hluboko položené v minimech potenciálu⁶ leží oblast záporných vlastních hodnot matice \mathcal{V} daleko vně kinematically dostupné oblasti. Systém je v této oblasti zcela regulární.

Při vzrůstající energii E se kinematically dostupná oblast zvětšuje, až v jednu chvíli dosáhne oblasti $\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)} < 0$, viz panel (b). Podle geometrické techniky by se při této energii měly objevit první náznaky nestability. Obrázek 2.4 potvrzuje, že tato korespondence existuje, avšak není zcela přesná. Regularita se začne bortit již při energii $E \approx -0.12$. Jak později uvidíme, tento kvantitativní nesouhlas nastává i při jiných hodnotách parametrů modelu.

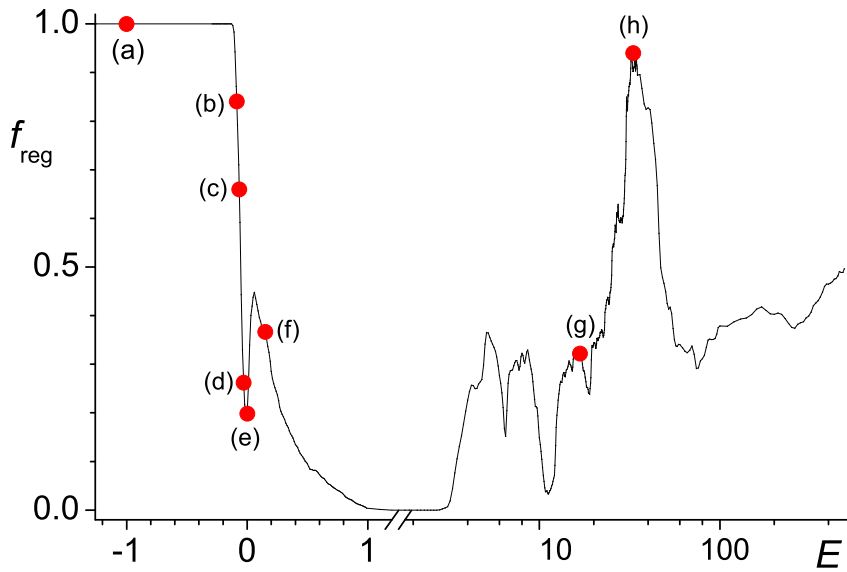
Zvedáme-li energii výše [panely (d)–(f)], projdeme nulovou energií a dostaneme se k bodu, ve kterém se hranice $\partial\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)}$ dotkne hranice $\partial\lambda_{\mathcal{V}}^{(2)}$. V blízkosti tohoto bodu pozorujeme na křivce $f_{\text{reg}}(E)$ maximum regularity.

Pro ještě vyšší energii $E = 16.8$ vznikne celá oblast záporných vlastních hodnot dovnitř kinematically dostupné oblasti. V regularitě se objevuje při této energii nepatrné

⁶Pro $A < 0$ leží minima potenciálu mimo počátek souřadné soustavy, tj. $\beta_{\text{min}} > 0$. Atomové jádro popsané modelem v této oblasti parametrů bude tedy deformované. Díky symetriím GCM systému (2.6) odpovídají všechna tři minima téměř fyzikálnímu stavu a jsou stejně hluboká.



Obrázek 2.3: Hranice kinematically dostupné oblasti (černě), hranice nulovosti menší vlastní hodnoty $\lambda_V^{(1)}$ matice \mathcal{V} (červeně) a hranice nulovosti větší vlastní hodnoty $\lambda_V^{(2)}$ matice \mathcal{V} (modře) pro GCM systém ve škálování $A = -1$ s parametrem $B = 1.09$ a různými energiemi. Kinematically dostupná oblast a záporné vlastní hodnoty se nacházejí vždy uvnitř ohraničených oblastí.



Obrázek 2.4: Závislost f_{reg} na energii E systému GCM ve škálování $A = -1$ s parametrem $B = 1.09$. Velké červené body odpovídají energiím, pro které jsou vykresleny jednotlivé panely obrázku 2.3.

maximum. Mnohem pozoruhodnější je pozorování, že tato energie je přibližně polovinou energie, na které se objevuje v závislosti $f_{\text{reg}}(E)$ ostré maximum. V tomto maximu je systém téměř úplně regulární: $f_{\text{reg}}(E = 33) \approx 0.95$. Na obrázku 2.3 (h) však v tomto bodě nepozorujeme žádné zvláštní změny, které by se zvýšením regularity korespondovaly. Původ tohoto výrazného maxima zůstává nadále neobjasněn, geometrická metoda zde nedává (až na uvedenou doměňku) žádné vysvětlení.

Poslední z panelů obrázku 2.3 ilustruje dění v limitě velmi vysokých energií. Kinematicky dostupná oblast se rozšiřuje a zaobluje, čímž v ní ostrov záporných vlastních čísel matice \mathcal{V} ztrácí na relativní velikosti. Regularita se v limitě $E \rightarrow \infty$ blíží k hodnotě 1, a to přibližně logaritmicky, jak je na základě numerických výpočtů ukázáno v přílohách I a II. Růst regularity lze objasnit tím, že při velkých energiích začíná převládat v potenciálu (2.9) kvartický člen β^4 na úkor neintegrabilního kubického členu $\beta^3 \cos 3\gamma$, který je jím více a více potlačován.

Po podrobnějším prozkoumání obrázku 2.3 lze učinit ještě tato pozorování:

1. Hranice $\partial\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)}$ protíná osu x ve stejných bodech pro všechny energie. Totéž platí díky symetrii i pro body, které získáme z těchto bodů otočením o $\pm 2\pi/3$ okolo počátku.
2. V místech, kde křivka $\partial\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)}$ prochází hranicí kinematicky dostupné oblasti ∂K , je tato hranice zakřivená ven (tj. je konkávní), zatímco ve zbývajících případech je konvexní.

Souvislost mezi konkavitou hranice ∂K a chaoticitou systému je jedním ze závěrů diskutovaných v příloze II, je v něm však uvedena také jako pouhé pozorování na základě

numerických výpočtů. Zde dokážeme, že uvedená pozorování platí pro systém GCM obecně.

Zakřivení hranice ∂K

Nejprve prozkoumejme konvexitu a konkavitu hranice ∂K . Využijeme k tomu skutečnosti, že mezi konvexní a konkávní částí jakékoliv křivky musí ležet inflexní bod. Navíc na základě učiněných pozorování obrázku 2.3 vidíme, že stačí hledat na přímce $y = 0$ (osa x). V tom samém okamžiku, kdy začne zcela konvexní hranice přecházet do konkávní, se na ose x pro funkci hranice vyjádřenou ve tvaru $x = x(y)$ objeví inflexní bod, ve kterém musí mít tato funkce druhou (podmínka pro inflexní bod) derivaci nulovou, tj.

$$\frac{\partial^2 x}{\partial y^2} = 0. \quad (2.24)$$

Funkci, která udává hranici kinematically dostupné oblasti, máme zadánu implicitně:

$$f(x, y) \equiv V(x, y) - E = 0. \quad (2.25)$$

Vyjádříme-li podle věty o derivaci implicitních funkcí druhou derivaci funkce $x(y)$ a položíme-li ji rovnu nule, dostaneme rovnici

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 - 2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 = 0, \quad (2.26)$$

která platí za předpokladu, že je splněna podmínka

$$\frac{\partial f}{\partial x} \neq 0. \quad (2.27)$$

Dosaďme nyní GCM potenciál (2.9). Využijeme-li již připravených vztahů (2.19) a (2.22) pro jeho první a druhé derivace a zaměříme-li se na zkoumání případu $y = 0$, dostaneme rovnici

$$x (2A - 6Bx + 4Cx^2) (2A + 3Bx + 4Cx^2) = 0 \quad (2.28)$$

s podmínkou⁷

$$x (2A + 3Bx + 4Cx^2) \neq 0. \quad (2.29)$$

Jediná dvě povolená řešení tedy jsou

$$x^{(1,2)} = \frac{6B \pm \sqrt{36B^2 - 32AC}}{8C}. \quad (2.30)$$

Pokud tyto kořeny $x^{(1,2)}$ dosadíme do potenciálu,

$$E^{(1,2)} = V(x, y) \Big|_{x=x^{(1,2)}, y=0}, \quad (2.31)$$

dostaneme hledané energie $E^{(1,2)}$, na kterých dochází ke vzniku, resp. zániku konkávních oblastí v hranici ∂K .

⁷Tato podmínka vlastně vylučuje všechny extrémní potenciálu, viz (2.14).

Vlastní hodnoty matice \mathcal{V}

Jako druhý krok explicitně vyjádříme vlastní čísla matice \mathcal{V} (1.44). Znovu se omezíme na případ $y = 0$, jelikož hledáme průnik záporného vlastního čísla dovnitř kinematically dostupné oblasti a podle pozorování na obrázku 2.3 k tomu dojde nejprve na ose x .

Vlastní hodnoty symetrické matice \mathcal{V} rozměru 2×2 jsou v úplně obecném případě dány vzorcem

$$\lambda_{\mathcal{V}}^{(1,2)} = \mathcal{V}_{11} + \mathcal{V}_{22} \pm \sqrt{(\mathcal{V}_{11} + \mathcal{V}_{22})^2 + 4(\mathcal{V}_{12}^2 - \mathcal{V}_{11}\mathcal{V}_{22})}. \quad (2.32)$$

Po dosazení vyjádření složek v našem konkrétním systému z rovnic (2.23) dostaneme pro $y = 0$ menší z vlastních hodnot (znaménko $-$)

$$\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)} = 2A - 6Bx + 4Cx^2. \quad (2.33)$$

Hranici $\partial\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)}$ na ose x nalezneme vyřešením rovnice $\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)} = 0$. Jejimi kořeny jsou

$$x_{\mathcal{V}}^{(1,2)} = \frac{6B \pm \sqrt{36B^2 - 32AC}}{8C}, \quad (2.34)$$

což jsou přesně stejné hodnoty jako (2.30). Příslušné energie $E_{\mathcal{V}}^{(1,2)}$, při které záporná vlastní čísla začnou vstupovat do oblasti vymezené hranicí ∂K , dostaneme řešením rovnice

$$V(x, y)|_{x=x_{\mathcal{V}}^{(1,2)}, y=0} - E_{\mathcal{V}}^{(1,2)} = 0, \quad (2.35)$$

kteří se shodují s hodnotami (2.31).

Výsledky (2.34) také vysvětlují pozorování 1 u obrázku 2.3. Na základě vztahu (2.34) vidíme, že hranice $\partial\lambda_{\mathcal{V}}^{(1)}$ protíná osu x stále ve stejných bodech nezávisle na energii systému E .

Shrnutí geometrické metody v GCM

Ukázali jsme, že geometrická metoda využívající křivostí dává v případě geometrického modelu zcela stejné výsledky jako metoda konvexně-konkávní hranice dostupné oblasti. Metodu konvexně-konkávní hranice jsme (numericky) použili v příloze II. Tam také ukazujeme, že přechod od regulární k chaotické dynamice popisuje jen kvalitativně. To znamená, že i geometrická metoda, alespoň v případě GCM, nedává žádné exaktní vodítko, které by jasně ukazovalo, kde bude systém regulární a kde chaotický. Je pouze ukazatelem možné nestability a určuje přibližnou hranici mezi stabilní a nestabilní dynamikou, kterou chaotické trajektorie respektují jen přibližně. Ilustrace je uvedena v následující části.

2.2.4 Kompletní mapa klasického chaosu

Tato část je určitým „završením“ studia klasického chaosu v GCM, měřeném veličinou f_{reg} . Bude se celá zabývat jedním rozsáhlým obrázkem 2.5, na němž je zobrazena kompletní mapa regulární části fázového prostoru v závislosti na energii E a zároveň na vnějších parametrech systému⁸, doplněna dalšími doprovodnými údaji a výsledky.

⁸Velmi vysoké energie v obrázku zakresleny nejsou, avšak na nich se již v systému nestane nic pozoruhodného. Regularita v nich postupně roste k hodnotě $f_{\text{reg}} = 1$. To je pro několik hodnot parametrů demonstrováno v přílohách I a II.

Nejprve obrázek podrobně popišme. Oblasti úplné regularity $f_{\text{reg}} = 1$ jsou zobrazeny červenou barvou, oblasti zcela chaotické $f_{\text{reg}} = 0$ naopak modře. Chyba Δf_{reg} ve všech bodech obrázku nepřekročí hodnotu 0.02. Na vertikální ose grafu je vynesena energie (kladné energie v logaritmickém měřítku, záporné v lineárním⁹). Horizontální osa zobrazuje vždy jeden volný parametr modelu. Je rozdělena na tři oblasti oddělené bílými čarami, ve kterých postupně procházíme zleva doprava cestu znázorněnou na obrázku 2.1. Číslo psané vpravo v popisku osy značí hodnotu volného parametru, fixovaný parametr pro dané škálování je uveden nad odpovídající oblastí. Číslo psané kurzívou odpovídá odlišnému škálování, ke kterému lze přejít pomocí vztahů (2.13). Uveďme příklad: V první části grafu je použito škálování s pevným $A = -1$ a s variabilním parametrem B . Čáry o konstantní energii jsou v tomto škálování znázorněny červenou čarou. Naopak kurzívou je uvedeno, jakou by v daném místě na vertikální ose měl hodnotu parametr A ve škálování $B = 1$, příslušné čáry konstantní energie jsou zobrazeny modře, vše přesně podle (2.13).

Levá i pravá hranice obrázku zobrazuje integrabilní případ $B = 0$. V nich je podle očekávání $f_{\text{reg}} = 1$. Při postupném zapínání neintegrabilní poruchy řízené parametrem B regularita zprvu monotónně klesá, poté však začne vykazovat velmi komplexní chování s bohatou strukturou údolí a hřebenů.

Zmíňme několik zajímavých oblastí. První z nich je pruh zvýšené regularity pro nízké energie a okolí bodu $B = 0.62$. Tato oblast je v úzkém vztahu k linii regularity¹⁰ složitějšího, avšak s GCM příbuzného kolektivního jaderného modelu, modelu interagujících bosonů¹¹, jak je ukázáno v článku [Mac07a]. V této oblasti dochází k rezonanci dvou frekvencí $\omega_\beta, \omega_\gamma$, což jsou nezávislé frekvence dvourozměrného harmonického oscilátoru, jímž lze aproximovat globální minimum potenciálu GCM. Tato rezonance koinciduje se zvýšenou regularitou a zdá se, že ovlivňuje chování systému daleko v oblasti energií, kde již kvadratická aproximace dávno neplatí. Maximum regularity je silně persistentní vůči změnám v systému, jak je patrné již ze zmíněné podobnosti dynamiky obou modelů IBM a GCM. Maximum přežívá také modifikace kinetického členu, které bude diskutovány později v části 2.2.5, a zůstává patrné i při nenulových rotacích, viz dodatky II.

Další aspekt mapy 2.5, který stojí za povšimnutí, je „žíla“ úplné regularity, která začíná na energii $E \approx 24$ a hodnotě nastavitelného parametru $A \approx -1.2$ při škálování $B = 1$ a táhne se směrem k vyšším A , přičemž se postupně rozšiřuje. Pokud bychom zůstali ve škálování $B = 1$, nenarazili bychom už na této energii na žádnou chaotickou oblast. Tento pruh plné regularity není jediný. Pro $A \gtrsim 0.6$ se na energii $E \approx 7$ vyskytuje méně výrazná sekundární „žíla“. Jev ostrého zvýšení regularity jsme pozorovali již dříve při zkoumání geometrické techniky, viz obrázek 2.4, a lze jej rovněž pozorovat na grafech příloh I a II. Výraznost „žil“ regularity je pozoruhodná, doposud však zůstává otevřenou otázkou příčina jejich vzniku.

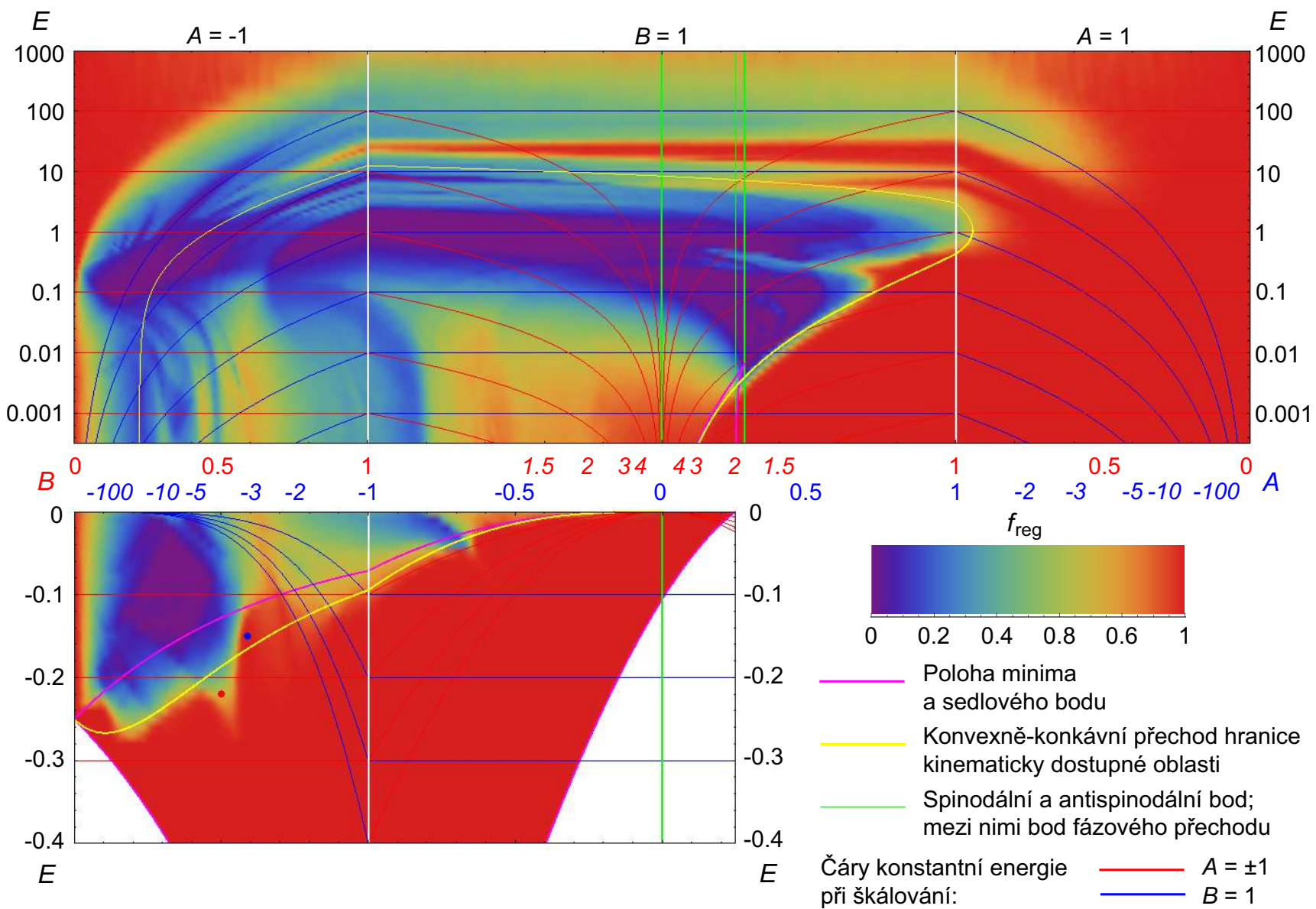
Obraťme nyní pozornost k čarám, které jsou v obrázku zakresleny. Růžová čára znázorňuje globální minimum potenciálu a sedlový bod (pro energii $E < 0$), resp. lokální minimum a maximum (pro energii $E > 0$) vypočtené podle rovnice (2.14) a v souladu s diskuzí uvedenou za touto rovnicí¹². Na energii $E = 0$ leží lokální maximum pro

⁹Regularitu na nulové energii, která sama o sobě vykazuje extrémně zajímavý průběh, lze rovněž vidět samostatně na obrázku 1.7.

¹⁰Arc of regularity.

¹¹Hamiltonián IBM a pohybové rovnice klasické limity tohoto modelu jsou uvedeny v dodatku A.

¹²Přesně tedy zobrazují hodnoty potenciálu $V(x_E^{(2,3)})$ při měnících se hodnotách parametrů modelu.

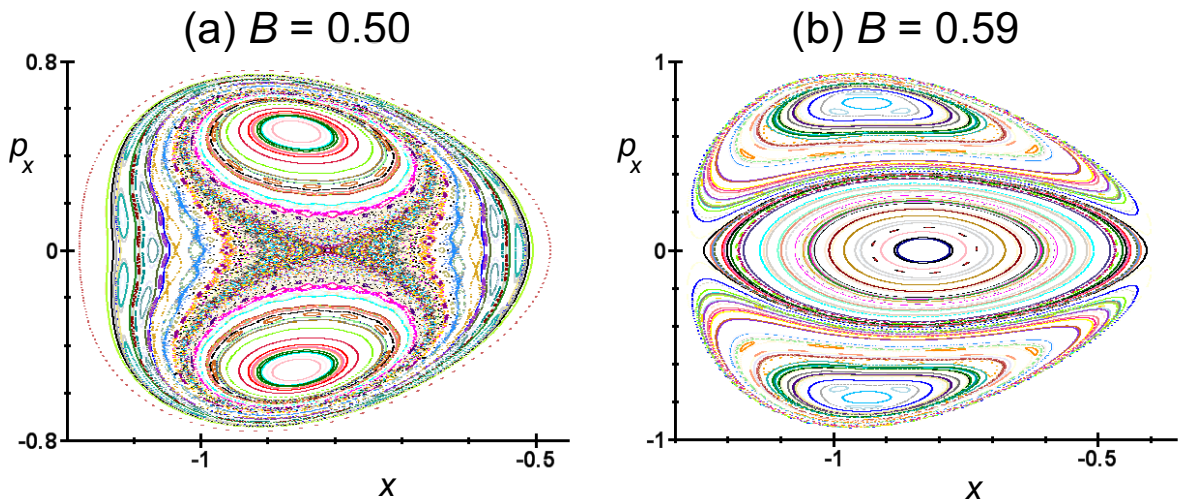


Obrázek 2.5: Úplná mapa regularity f_{reg} systému GCM v závislosti na parametrech modelu a na energii. Podrobnější popis obrázku v textu.

$\tau < 1/4$ a globální minimum pro $\tau > 1/4$.

Na $A = 1/4$ nastává již zmiňovaný fázový přechod. Je vyznačen prostřední ze zelených čar. Spinodální a antispinodální body v $A = 0$, resp. $A = 9/32$, které ohraničují oblast fázové koexistence, jsou vyznačeny rovněž zeleně. V oblasti fázového přechodu pozorujeme prudký nárůst chaotičnosti s $f_{\text{reg}} \approx 0$, který se šíří se vzrůstající energií na obě strany od fázového přechodu (na obrázku vytváří tvar modrého V). Fázový přechod s sebou tedy přináší velkou nestabilitu.

Žlutá čára reprezentuje body, ve kterých kinematically dostupnou oblastí systému začnou (nebo přestanou) procházet záporná vlastní čísla matice \mathcal{V} , tj. ukazuje hodnoty $V(x = x_V^{(1)}, y = 0)$ (silnější čára) a $V(x = x_V^{(2)}, y = 0)$ (slabší čára), kde $x_V^{(1,2)}$ jsou dány vztahem (2.34). Zopakujme zde tvrzení geometrické metody uvedené ve článku [Hor07], podle kterého by hranice vyznačená silně měla oddělovat oblast regularity (v energiích níže) od oblasti, kde se vyskytují nestabilní (chaotické) trajektorie (v energiích výše), a jak bylo ukázáno v předchozí části, hranice přesně koresponduje s místem, ve kterém se začínají v plně konvexní hranici dostupné oblasti objevovat konkávní úseky.



Obrázek 2.6: Poincarého řezy systému GCM ve škálování $A = -1$ s volným parametrem a energií (a) $B = 0.5$, $E = -0.22$ a (b) $B = 0.59$, $E = -0.15$. V každém řezu je znázorněno 1000 průchodů rovinou řezu pro 100 odlišných trajektorií. Řezy slouží jako demonstrace odchylek geometrické metody.

Mapa regularity demonstruje přibližnou platnost tvrzení. Vidíme z ní, že hranice regularita–počátek chaosu dobře koresponduje se žlutou linií například pro oblasti

1. $B \in (0.2, 0.4)$ ve škálování $A = -1$
2. $A \in (-1, -0.8)$ ve škálování $B = 1$
3. $A \in (-0.6, 0.7)$ ve škálování $B = 1$

Chaos se většinou začne objevovat již chvíli před žlutou linií. Na druhou stranu existují protipříklady, kde přes žlutou čáru proniká jak regularita směrem dovnitř, tak chaotičnost směrem ven. Na obrázku 2.6 jsou nakresleny Poincarého řezy dvou z nich. První, zobrazený na panelu (a), je zakreslen červeným puntíkem v obrázku mapy chaosu. Na

samotném řezu je patrný vysoký stupeň chaoticity, ač leží v oblasti, kde by podle geometrického kritéria měl být systém stabilní. Druhý protipříklad je ilustrován řezem na panelu (b) a v mapě chaosu mu odpovídá modrý puntík. Nyní naopak zcela regulární řez leží v nestabilní oblasti. Rovněž celá „žíla“ regularity se nachází v oblasti, pro kterou geometrická metoda žádnou zvýšenou stabilitu nepředpovídá, viz část 2.2.3.

Metoda křivosti dále říká, že v oblasti $A = 1$ by měl být systém pro $B < \sqrt{8/9}$ zcela regulární, neboť zde vlastní hodnoty matice \mathcal{V} (1.44) mají v kinematically dostupné oblasti pouze kladné hodnoty (matice má dokonce kladné hodnoty v celém konfiguračním prostoru). Ve skutečnosti chvost chaotičnosti na vysokých energiích $10 \lesssim E \lesssim 100$ zasahuje až do oblasti $B \sim 0.5$.

Náznak korespondence přechodu regularita–chaos a žluté čáry lze naopak pozorovat pro druhou hranici zakreslenou slabou čarou (s ní totiž sousedí slabší regulární „žíla“). Nutno však zdůraznit, že podle teorie geometrické metody by na této hranici nemělo docházet k žádným výrazným kvalitativním změnám chování, jelikož oblast záporných vlastních hodnot matice \mathcal{V} zůstává i pro energie za touto hranicí uvnitř kinematically dostupné oblasti ∂K , viz obrázek 2.3 (g)–(i).

Závěrem lze shrnout, že geometrická metoda je dobrým vodítkem pro vyskytující se nestabilitu, pokud se nacházíme v dostatečné vzdálenosti od linie, kterou ona určuje jako hranici mezi regularitou a chaosem.

2.2.5 Další rozšíření geometrického modelu

Tato část se bude zabývat dvěma možnými rozšířeními GCM modelu. Rozšíření se týkají pouze kinetického členu, potenciál ponecháváme ve tvaru (2.9). Jak bude patrné později v části 2.3, geometrický model tak, jak jsme jej doposud uvažovali, má určité nefyzikální vlastnosti týkající se momentu setrvačnosti (moment setrvačnosti je nulový pro nulové deformace). Vhodná rozšíření kinetického členu tyto nefyzikální aspekty odstraní či alespoň zmírní. Ačkoliv stále zůstaneme omezeni na nulové rotace, při kterých moment hybnosti nehraje žádnou roli, zodpovíme na otázku, do jaké míry ovlivní dodatečné členy v Hamiltoniánu chaotičnost systému.

Budeme sledovat stejný postup jako u klasického geometrického modelu, stručně zde uvedeme všechny vztahy důležité pro výpočet dynamiky a míry chaosu f_{reg} . Obě rozšíření, která budeme brát v úvahu, obsahují další hmotnostní parametry κ a λ , jež však spolu s parametrem K nejsou nezávislé. Nezávislé jsou pouze dva ze tří, a bereme-li v úvahu škálování, pak je nezávislý pouze jeden, za který budeme při výpočtech brát parametr κ . Hodnotu druhého parametru zafixujeme na $\lambda = 1$. Všechny vztahy však uvedeme v naprosté obecnosti se všemi hmotnostními parametry.

Potenciál ponecháváme stejný, díky čemuž se spousta vlastností systému rozšířením nemění. Systém například zůstává integrabilní pro $B = 0$. Systém také spojitě přejde na standardní GCM, položíme-li v rozšířených modelech $\kappa = 0$, $\lambda = 1$.

Poznamenejme, že modifikace kinetických členů geometrického Hamiltoniánu (především jeho momentů setrvačnosti) je důležitá při přechodu od GCM k souvisejícímu modelu kolektivní dynamiky — modelu interagujících bosonů. Diskuzí chaotických vlastností IBM a srovnáním obou modelů se zabývají práce [Mac07a, Mac07b, Mac09, Cej06, Str09c].

Rozšíření typu I

Kinetický člen prvního z modifikovaných modelů má Hamiltonián

$$T^{(I)} = \frac{\lambda + \kappa\beta^2}{2K} (p_x^2 + p_y^2) \equiv \frac{p^2}{2k^{(I)}(\beta)}, \quad (2.36)$$

kde jsme označili

$$k^{(I)}(\beta) \equiv \frac{K}{\lambda + \kappa\beta^2}. \quad (2.37)$$

Pohybové rovnice znějí

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{p_x}{k^{(I)}(\beta)} & \frac{dp_x}{dt} &= \frac{\kappa}{K} p^2 x - V_x \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{p_y}{k^{(I)}(\beta)} & \frac{dp_y}{dt} &= \frac{\kappa}{K} p^2 y - V_y \end{aligned} \quad (2.38)$$

[při využití označení (2.19)] a Jacobiho matice potřebná pro výpočet divergencí sousedních trajektorií

$$J^{(I)} = \begin{pmatrix} \frac{2\kappa}{K} p_x x & \frac{2\kappa}{K} p_x y & \frac{1}{k^{(I)}(\beta)} & 0 \\ \frac{2\kappa}{K} p_y x & \frac{2\kappa}{K} p_y y & 0 & \frac{1}{k^{(I)}(\beta)} \\ -\frac{\kappa}{K} p^2 - V_{xx} & -V_{xy} & -\frac{2\kappa}{K} p_x x & -\frac{2\kappa}{K} p_y x \\ -V_{xy} & -\frac{\kappa}{K} p^2 - V_{yy} & -\frac{2\kappa}{K} p_x y & -\frac{2\kappa}{K} p_y y \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

[druhé derivace potenciálu viz (2.22)].

Pro srovnání stupně regularity se standardním GCM je k dispozici obrázek 2.7. Jedná se o závislost f_{reg} na vnějším parametru při procházení známé cesty parametrickým prostorem (viz obrázek 2.1) pro energii $E = 0$. Pozorujeme, že při rostoucím κ se výrazně proměňuje intermediální oblast $0.1 \lesssim B \lesssim 0.6$, zatímco pro ostatní hodnoty parametrů zůstává kvalitativní průběh křivky stejný. Důležité je, že zejména ostré maximum na linii regularity v okolí $B = 0.6$ zůstává na svém místě. Podobně i minimum okolo $A = -1$, $B = 1$ a následný růst k plné regularitě při $A = 0$, $B = 1$ (zde je systém na nulové energii plně regulární, ač není integrovatelný).

Rozšíření typu II

Druhá modifikace standardního GCM vychází z kinetického členu

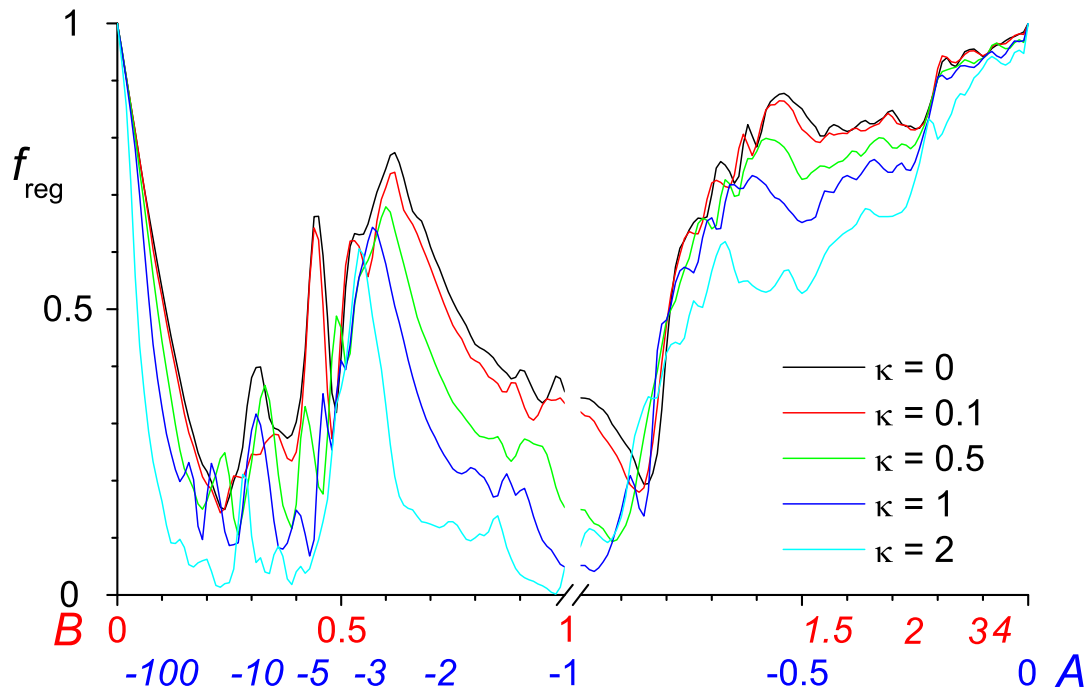
$$T^{(II)} = \frac{1}{2K(\lambda + \kappa\beta^2)} (p_x^2 + p_y^2) \equiv \frac{p^2}{2k^{(II)}(\beta)}, \quad (2.40)$$

kde tentokrát značíme

$$k^{(II)}(\beta) = K(\lambda + \kappa\beta^2). \quad (2.41)$$

Pohybové rovnice a Jacobiho matice, opět s použitím označení (2.19) a (2.22), znějí

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{p_x}{k^{(II)}(\beta)} & \frac{dp_x}{dt} &= \frac{\kappa K}{k^2(\beta)} p^2 x - V_x \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{p_y}{k^{(II)}(\beta)} & \frac{dp_y}{dt} &= \frac{\kappa K}{k^2(\beta)} p^2 y - V_y \end{aligned} \quad (2.42)$$



Obrázek 2.7: Regularita při nulové energii v rozšířeném GCM (typ I) pro různé hodnoty rozšiřujícího parametru κ . Pro $\kappa = 0$ systém koresponduje se standardním geometrickým modelem. Chyba výpočtu nepřekročí hodnotu $\Delta f_{\text{reg}} = 0.02$. K hodnotám na horizontální ose viz popis obrázku 2.5 v textu.

a

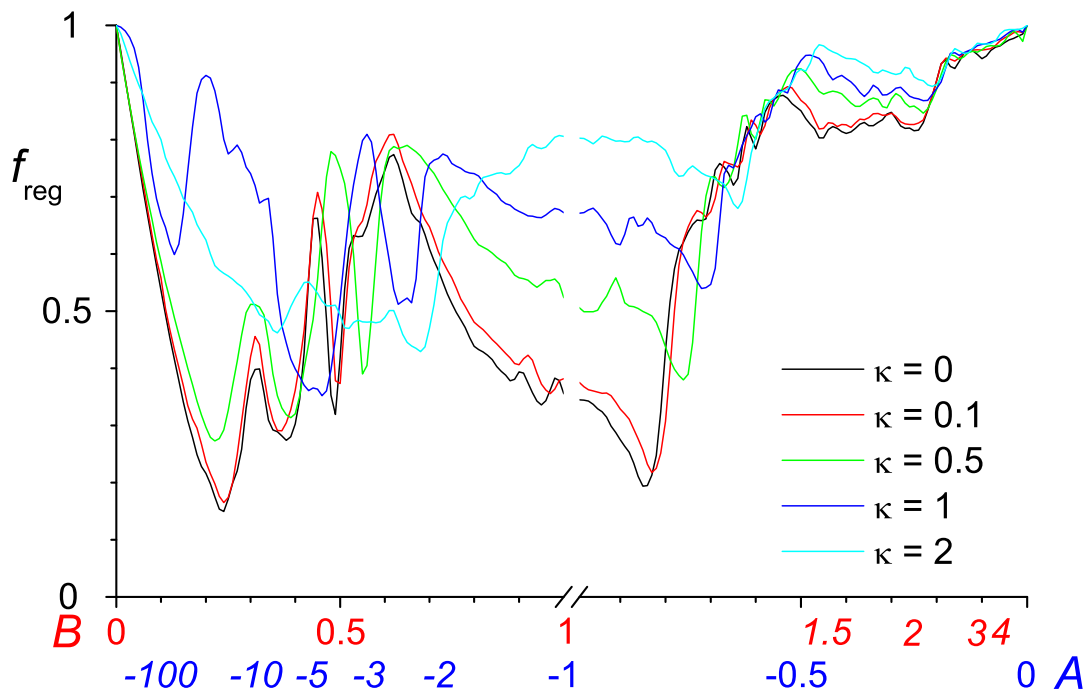
$J^{(\text{II})} =$

$$\begin{pmatrix} -\frac{2K\kappa}{k^2(\beta)} p_x x & -\frac{2K\kappa}{k^2(\beta)} p_x y & \frac{1}{k^{(\text{II})}(\beta)} & 0 \\ -\frac{2K\kappa}{k^2(\beta)} p_y x & -\frac{2K\kappa}{k^2(\beta)} p_y y & 0 & \frac{1}{k^{(\text{II})}(\beta)} \\ \frac{\kappa K}{k^2(\beta)} \left(\frac{4\kappa K}{k^{(\text{II})}(\beta)} x^2 - 1 \right) p^2 - V_{xx} & -\frac{(2\kappa K)^2}{k^3(\beta)} xy - V_{xy} & \frac{2K\kappa}{k^{(\text{II})}(\beta)} p_x x & \frac{2K\kappa}{k^{(\text{II})}(\beta)} p_y x \\ -\frac{(2\kappa K)^2}{k^3(\beta)} xy - V_{xy} & \frac{\kappa K}{k^2(\beta)} \left(\frac{4\kappa K}{k^{(\text{II})}(\beta)} y^2 - 1 \right) p^2 - V_{yy} & \frac{2K\kappa}{k^{(\text{II})}(\beta)} p_x y & \frac{2K\kappa}{k^{(\text{II})}(\beta)} p_y y \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

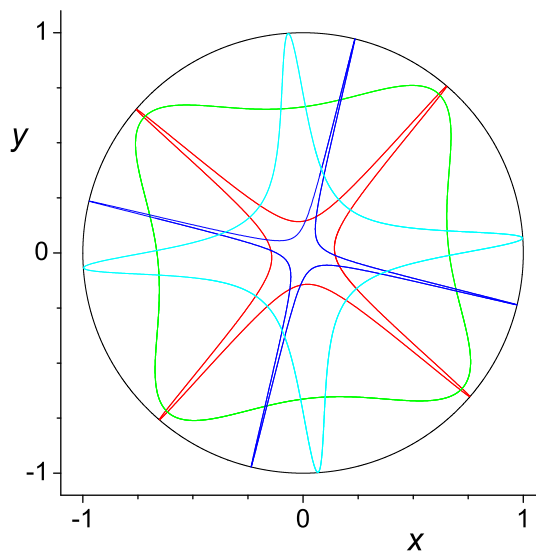
Srovnání regularity tohoto modelu a nerozšířeného GCM lze vidět na obrázku 2.8. U tohoto modelu již dochází k výraznějším změnám, patrný je zejména nárůst průměrné regularity s rostoucím κ . Důležité struktury, zejména opět rozsáhlé maximum okolo $B \approx 0.6$ se však objevují i zde.

Výrazné odchylky pozorujeme pro malé hodnoty parametru κ . Pro hodnotu $\kappa = 0$ má systém navíc pozoruhodnou vlastnost. V integrabilním případě $B = 0$, $A = -1$ (potenciál ve tvaru mexického klobouku), jsou při nulové energii *všechny trajektorie periodické* (pro jiné energie a jiné hodnoty parametrů toto již neplatí), viz příklad několika trajektorií na obrázku 2.9.

Modifikace typu II geometrického modelu je rovněž studována v příloze III.



Obrázek 2.8: Stejně jako obrázek 2.7, avšak pro rozšíření GCM typu II.



Obrázek 2.9: Několik náhodně vybraných trajektorií rozšířeného GCM modelu s kinetickým členem (2.40) s parametry $A = -1$, $B = 0$, $\kappa = 1$. Černou čarou je znázorněna kinematicky dostupná oblast.

Na příkladu regularity při nulové energii jsme ukázali, že navržená rozšíření kinetického členu geometrického modelu nijak výrazně nemění chaotické vlastnosti systému. Nedojde například k posunu nebo vymizení důležitého maxima související s linií regularity modelu IBM. Lze tedy usuzovat, že odstranění nefyzikálního chování momentu setrvačnosti s sebou nenese výrazné změny týkající se důležitých vlastností chaotické dynamiky.

2.3 Kvantování

V této části obrátíme naši pozornost ke kvantové verzi geometrického modelu. Zmíníme dva odlišné fyzikálně relevantní způsoby kvantování, které umožní studovat vliv kvantování na chaotické vlastnosti kvantového systému. Podrobně popíšeme proces diagonalizace a konvergence vlastních hodnot při použití konečné báze. Na závěr ukážeme výsledky vycházející jednak ze spektrálních statistik (závislost Brodyho parametru a parametru $1/f$ šumu na energii a jejich srovnání s klasickým f_{reg}), jednak z vizuální Peresovy metody (kompletní přehled Peresových mříží).

Kvantovou verzí GCM se podrobně zabývají články [Str09a] (spektrální statistiky hladin a srovnání kvantové a klasické míry chaosu), který je uveden v příloze IV, a [Str09b] (Peresova metoda), přetištěný v příloze V.

2.3.1 5D kvantování

Vyjdeme z úplného Hamiltoniánu geometrického modelu s pěti stupni volnosti (odtud označení 5D), obsahujícím kinetický člen (2.2) a potenciál (2.9). Hamiltonián kvantujeme v „ x -reprezentaci“ zavedením operátorů

$$\pi_\mu = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha_\mu} \quad (2.44)$$

splňujícími komutační relace mezi hybností a souřadnicí

$$[\alpha_\mu, \pi_\nu] = i\hbar \delta_{\mu\nu}. \quad (2.45)$$

To vede na kinetický člen v proměnných vnitřní soustavy [Eis70, Hru08]

$$\begin{aligned} T &= T_{\text{vib}} + T_{\text{rot}} \\ T_{\text{vib}} &= -\frac{\hbar^2}{2K} \left(\frac{1}{\beta^4} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta^4 \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right) \\ T_{\text{rot}} &= \frac{1}{2K} \frac{1}{4\beta^2} \sum_{k=1}^3 \frac{J_k^2}{\sin^2 \left(\gamma - \frac{2\pi}{3} k \right)}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

kde J_k jsou složky momentu hybnosti. Rotační člen můžeme vyjádřit pomocí momentu setrvačnosti \mathcal{I}_k ,

$$T_{\text{rot}} = \sum_{k=1}^3 \frac{J_k^2}{2\mathcal{I}_k}, \quad (2.47)$$

jehož explicitní tvar, získaný srovnáním posledních dvou výrazů, zní

$$\mathcal{I}_k = 4K\beta^2 \sin^2 \left(\gamma - \frac{2\pi}{3}k \right). \quad (2.48)$$

Jak bylo již zmíněno v části 2.2.5, moment setrvačnosti závisí na souřadnici β a pro $\beta = 0$ nabývá nefyzikální hodnoty $\mathcal{I}_k = 0$. To znamená, že rotace nedeformovaného tvaru nenese žádnou energii nezávisle na velikosti úhlové frekvence.

My budeme, stejně jako v klasickém případě GCM, uvažovat jen podtřídu pohybů s nulovými rotacemi $T_{\text{rot}} \equiv 0$. Takto omezený kinetický člen, tvořený pouze vibrační částí T_{vib} , označíme $T^{(5D)}$.

Kvantová verze systému rovněž podléhá symetriím (2.6), které vyplývají z nejednoznačnosti umístění systému do vnitřní souřadné soustavy. Díky tomu splňují vlnové funkce relace

$$\begin{aligned} \Psi(\beta, \gamma) &= \Psi \left(\beta, \gamma + \frac{2\pi}{3} \right) \\ \Psi(\beta, \gamma) &= \Psi(\beta, -\gamma). \end{aligned} \quad (2.49)$$

2.3.2 2D kvantování

Druhá možnost kvantování spočívá v následujícím postupu: Systém nejprve umístíme do vnitřní souřadné soustavy, čímž upevníme tři rotační stupně volnosti, a teprve poté provedeme kvantování. Kinetický člen (2.17) kvantujeme vztahy

$$\begin{aligned} p_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ p_y &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \end{aligned} \quad (2.50)$$

splňujícími standardní komutační relace mezi momentem hybnosti a souřadnicí. Tím obdržíme

$$T^{(2D)} = -\frac{\hbar^2}{2K} \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial \gamma^2} \right). \quad (2.51)$$

Jelikož jsme kvantovali ve vnitřní souřadné soustavě, ve které již byla fixována jedna pevně vybraná realizace symetrií (2.6), nevede tento kinetický člen implicitně k podmínkám pro vlnové funkce (2.49). Chceme-li srovnávat řešení obou druhů kvantování, musíme tyto podmínky dodat ručně. To se týká volby vhodné báze. Pokud bude báze symetrie (2.49) splňovat, bude je samozřejmě splňovat i libovolná vlnová funkce.

U 2D systému existují dvě možnosti symetrie řešení. Podle volby bázevých stavů budou vlnové funkce buď sudé nebo liché vůči záměně $\gamma \leftrightarrow -\gamma$. Přesto zůstane hustota pravděpodobnosti sudá, jak to vyžaduje (2.6). Podle podmínek (2.49) s 5D případem nejtěsněji souvisí pouze sudý systém, avšak liché rozšíření poskytuje další třídu řešení, kterou můžeme použít ke srovnání projevů kvantového chaosu při různých verzích kvantování téhož systému. Ačkoliv nelze očekávat, že spektra systému s různým kvantováním budou totožná, podle Bohigasovy hypotézy [Boh84] by spektrální statistiky měly být stejné.

Kromě 2D a 5D způsobu kvantování geometrického modelu lze nalézt dalších nekočetně mnoho možností kvantování. Uvažovaná dvě však mají dobrý fyzikální smysl.

Kvantová verze obsahuje kromě fundamentálního parametru τ (2.10), udávajícího tvar potenciálu, ještě parametr $\kappa = \hbar^2/K$ (2.11), jehož snižování zvyšuje hustotu hladin systému. Nastavování parametru „klasičnosti“ κ tedy umožňuje pro dané τ zkoumat přesné spektrální statistiky na širokém intervalu energií i při konečném počtu hladin získaných numericky. My budeme fixovat $K = 1$ a měnit přímo hodnotu Planckovy konstanty systému. Tento přístup se ukazuje výhodným zejména při použití Peresovy metody, jelikož pro určité Peresovy operátory dovoluje kvantitativně srovnat mříže získané pro stejné parametry systému, avšak s rozdílnou hodnotou parametru klasičnosti, viz příloha V. Z hlediska kvalitativního chování systému je přístup fixované „hmotnosti“ K zcela ekvivalentní postupu, ve kterém ponecháme Planckovu konstantu konstantní a proměňujeme K . Ilustrace vlivu parametru κ na výsledné spektrum jsou v přílohách IV a V.

2.3.3 Diagonalizace

Systém je diagonalizován v bázi harmonického oscilátoru, který přesně odpovídá Hamiltoniánu 2.2. Jeho potenciál ve vnitřní souřadné soustavě zní

$$V_{\text{osc}} = A_{\text{osc}}\beta^2. \quad (2.52)$$

kde A_{osc} je parametr báze, který můžeme nastavit a tím docílit co nejlepší konvergence výpočtu. K potenciálu je nutno přidat odpovídající 2D či 5D kinetický člen. Vlnové funkce bází v obou kvantováních jsou dány analytickými výrazy obsahujícími Laguerrovy polynomy, viz příloha IV. Tvar vlnových funkcí báze rovněž závisí na typu kvantování, pro uvažované typy 2D a 5D kvantování jsou však příbuzné. Energie jednotlivých bazových stavů jsou

$$\begin{aligned} \epsilon_{nm}^{(2D)} &= \hbar\Omega (2n + 3m + 1), \\ \epsilon_{\nu\mu}^{(5D)} &= \hbar\Omega \left(2\nu + 3\mu + \frac{5}{2} \right), \end{aligned} \quad (2.53)$$

kde $\Omega = \sqrt{2A_{\text{osc}}/K}$ a (n, m) , resp. (ν, μ) jsou kvantová čísla ve 2D, resp. 5D kvantování, nabývající hodnot $0, 1, 2, \dots$

Výpočtu maticových elementů se podrobně věnuje příloha IV, kde jsou také uvedeny explicitní algebraické vztahy pro prvky matice GCM Hamiltoniánu v bázi (2.52). Možnost přímého algebraického vyjádření maticových elementů snižuje numerickou náročnost výpočtu spektra. Bazové stavy jsou vybírány tak, aby jejich energie splňovala

$$\epsilon_{mn} < \hbar\Omega N_{\text{max}} \quad (2.54)$$

(vztah je stejný pro stavy ve 2D i 5D kvantování), přičemž jako N_{max} jsme označili maximální možnou energii bazových stavů v jednotkách $\hbar\Omega$. Jedná se o konstantu, kterou zvenčí omezíme velikost báze.

Hamiltonovu matici je možné uspořádat do pásové formy (díky výběrovým pravidlům mezi maticovými elementy), což umožní použít efektivní algoritmy pro diagonalizaci. Matice má podle (2.53) rozměr přibližně

$$d \approx \frac{1}{2} \frac{N_{\text{max}}}{2} \frac{N_{\text{max}}}{3} = \frac{N_{\text{max}}^2}{12}, \quad (2.55)$$

avšak šířka b nenulového pásu je srovnatelná hodnotou

$$b \approx 2N_{\max}. \quad (2.56)$$

Díky tomu, že Hamiltonova matice je symetrická, je nezávislá je pouze polovina hodnot nad diagonálou. Matice rozměru d má tedy

$$n_B = d * \frac{b}{2} = d\sqrt{3d} \quad (2.57)$$

elementů. Do 1GB RAM paměti, pokud čísla reprezentujeme 8bytovým typem `double`, se vejde pásová matice dimenze $d \approx 170000$, zatímco v případě celé čtvercové matice jsme schopni do stejného množství paměti umístit pouze matici s rozměrem $d \approx 11000$ ¹³. Druhou otázkou je samozřejmě časová náročnost výpočtu. Ta roste u použité metody zhruba se třetí mocninou rozměru matice, přičemž pro matici rozměru $d = 100000$ trvá výpočet na jednom jádru procesoru Intel Q9550 3GHz přibližně 60 hodin. Z toho vyplývá, že rozměr matice $d = 100000$ odpovídající $N_{\max} = 1100$ je rozumný limit dosažitelný na většině dnešních počítačů. K diagonalizaci je použita procedura `dsbevz` z knihovny LAPACK, speciálně určená k nalezení vlastních čísel a volitelně také vlastních vektorů symetrických pásových matic.

Geometrický model nám tedy nabízí možnost výpočtu velkého souboru hladin, čehož je velkou výhodou při zkoumání jemných jevů. Kromě této práce bylo tohoto aspektu využito při studiu kvantových fázových přechodů na excitovaných stavech [Cej08].

Zabýváme se nyní konvergencí diagonalizace v konečné bázi. V ní budou přesné energie GCM systému dobře aproximovány pouze částí vlastních hodnot konečné matice Hamiltoniánu. Vzdálenosti mezi hladinami s_i budou k přesnosti výpočtu ještě citlivější, jelikož při jejich výpočtu jsou odečítána blízká čísla, jejichž vzdálenost se s rostoucí energií dále snižuje (z důvodu rostoucí hustoty hladin systému). Získáme-li diagonalizaci kromě vlastních hodnot i vlastní vektory, pak dobře konvergující hladiny od zbytku odlišují zanedbatelné hodnoty ve složkách vlastních vektorů pocházejících od stavů báze blízkých oříznutí N_{\max} . Pokud zanedbatelné nejsou, znamená to, že má daný stav tendenci „přelézt“ za hranici použité báze a k jeho popisu jsou potřeba další stavy, které již v bázi chybí.

Výpočet vlastních vektorů je však náročný na paměť počítače a pro větší matice nemožný. Konvergenci jsme proto zkoumali odlišnou metodou, která je ilustrována na obrázcích 2.10 a 2.11. Spektrum GCM systému jsme spočítali pro jednu sadu parametrů s různými velikostmi bází. Pro energetické spektrum vypočítané pro dané hodnoty parametrů a dvě báze o velikostech $d_1 < d_2$

$$\begin{aligned} E_i^{(d_1)}, & \quad i = 1, \dots, d_1 - 1 \\ E_j^{(d_2)}, & \quad j = 1, \dots, d_2 - 1 \end{aligned} \quad (2.58)$$

definujeme absolutní

$$\Delta E_i \equiv \left| E_i^{(d_1)} - E_i^{(d_2)} \right| \quad (2.59)$$

¹³Nepočítáme samozřejmě režii, kterou potřebuje diagonalizační procedura. Pokud nepožadujeme vlastní vektory, je tato dodatečná paměť vůči velikosti matice zanedbatelná. Hledáme-li i vlastní vektory, paměťová náročnost prudce vzroste, neboť k jejich uložení již potřebujeme pole o velikosti d^2 .

a relativní diferenci

$$\delta E_i \equiv \frac{\Delta E_i}{E_i^{(d_1)}}, \quad (2.60)$$

kde $i = 1, \dots, d_1 - 1$. Je-li určitá energetická hladina stabilní při zvětšení báze, tj. její difference je malá, znamená to, že tato hladina dobře konverguje již v menší bázi.

Podívejme se nyní na ilustraci této metody na obrázku 2.10. Pro výpočet spekter ve 2D kvantování geometrického modelu s $B = 0.62$, $A = -1$ a Planckovou konstantou $\kappa = 0.005$ tu byly použity báze velikostí $d_1 = 19360$ ($N_{\max 1} = 480$) a $d_2 = 39905$ ($N_{\max 2} = 690$). Panel (a) znázorňuje absolutní difference, panel (b) relativní difference v závislosti na energii. Vložený graf v panelu (b) ukazuje relativní difference v závislosti na indexu hladiny. Pozorujeme, že pro nízkoležící hladiny jsou relativní odchylky téměř nulové. Tyto hladiny bezpečně konvergují. Od určité hladiny však začne odchylka prudce růst, což značí rychle se zhoršující přesnost určení spektra. Citlivost výpočtu spektrálních statistik je znázorněna na panelu (c). Je zde zakreslen Brodyho parametr v závislosti na energii (details výpočtu budou uvedeny v následující části) pro obě velikosti báze a růžovou čarou je zachycen okamžik, ve kterém se obě křivky začnou rozcházet. Polohu růžové čáry lze chápat jako mez přesnosti výpočtu v menší z obou bází. Závěr tedy zní: Ze souboru vypočtených hladin $E_i^{(d_1)}$ lze brát ty, které vyhovují podmínce $\delta E_i < 10^{-2}$. To odpovídá necelým 9000 hladinám z celkového počtu 19360.

Uvedený postup byl je ještě jednou zopakován pro $d_1 = 39905$ ($N_{\max 1} = 690$) a $d_2 = 59080$ ($N_{\max 2} = 840$), viz obrázek 2.11. Výpočet Brodyho parametru je opět stabilní pro necelou polovinu získaného spektra.

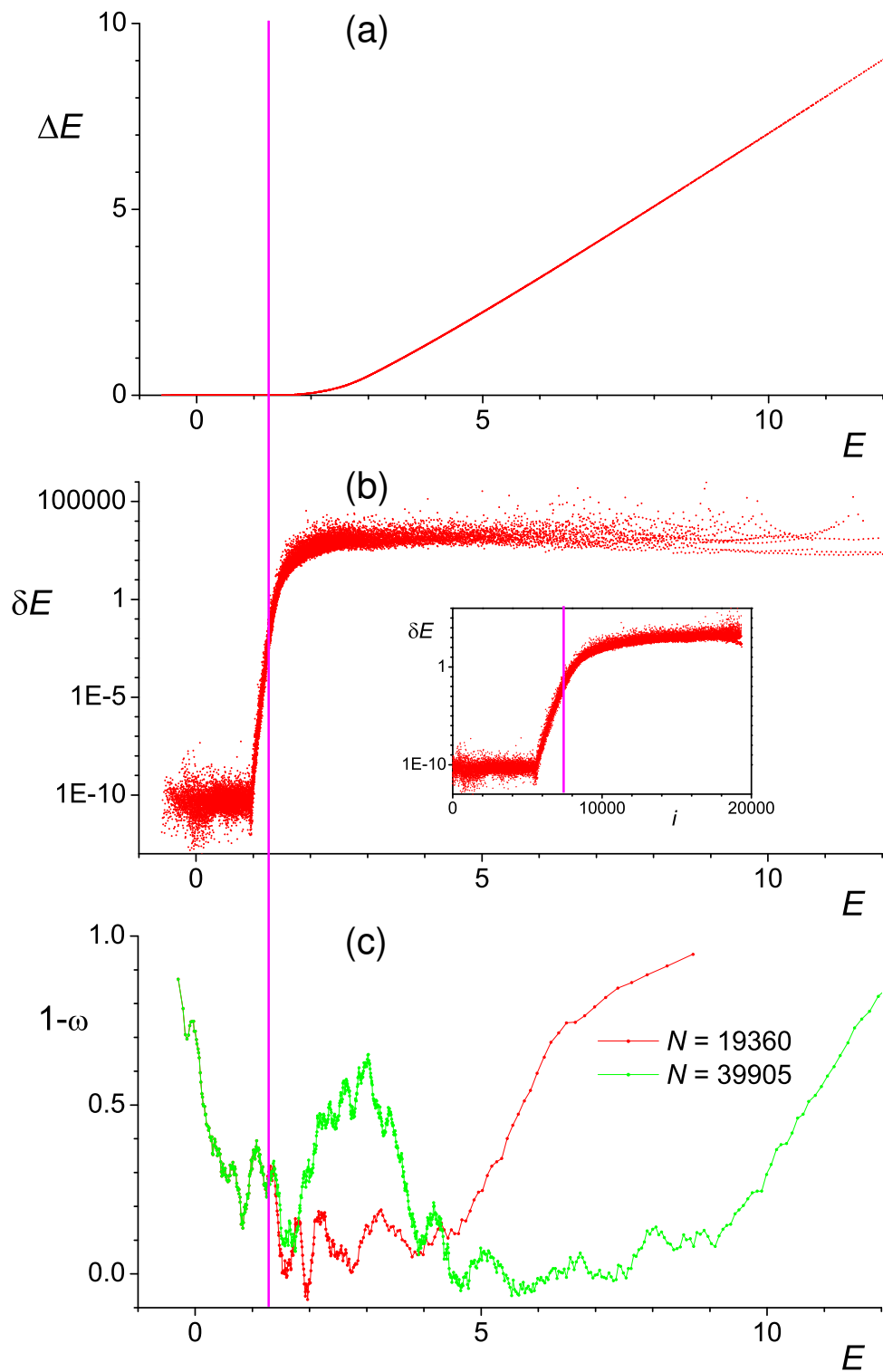
Konvergence samozřejmě závisí na parametrech modelu a na velikosti Planckovy konstanty. Je-li Planckova konstanta malá (tj. stavy jsou velmi blízko u sebe) a volíme-li takové parametry, že minimum systému leží mimo počátek souřadné soustavy (deformovaný tvar), bude velké množství stavů lokalizovaných v tomto minimu. Jelikož má systém báze minimum v počátku souřadné soustavy, bude potřeba obrovského množství báze, aby diagonalizace konvergovala. Pro velmi malé \hbar se nám tedy podaří získat jen velmi malý počet dobře konvergujících hladin (nebo dokonce vůbec žádnou). V tomto případě lze zpřesnit výpočet jen vhodnější volbou báze.

Na závěr zkusme závislost konvergence na parametru A_{osc} . Jeho optimální metodu lze určit podobným postupem jako konvergenci. Diagonalizace v konečné bázi dává horní aproximaci skutečných vlastních hodnot (které bychom dostali v bázi úplné). To znamená, že pro zvolené hodnoty parametrů GCM existuje optimální $A_{\text{osc}}^{(o)}$, pro které jsou energie co nejnižší. Pro dobře konvergující systém není optimální hodnota jen jedna, nýbrž lze volit libovolnou hodnotu z intervalu $A_{\min} < A_{\text{osc}}^{(o)} < A_{\max}$. Heuristikou jsme zjistili, že optimální $A_{\text{osc}}^{(o)}$ nalezneme tímto způsobem:

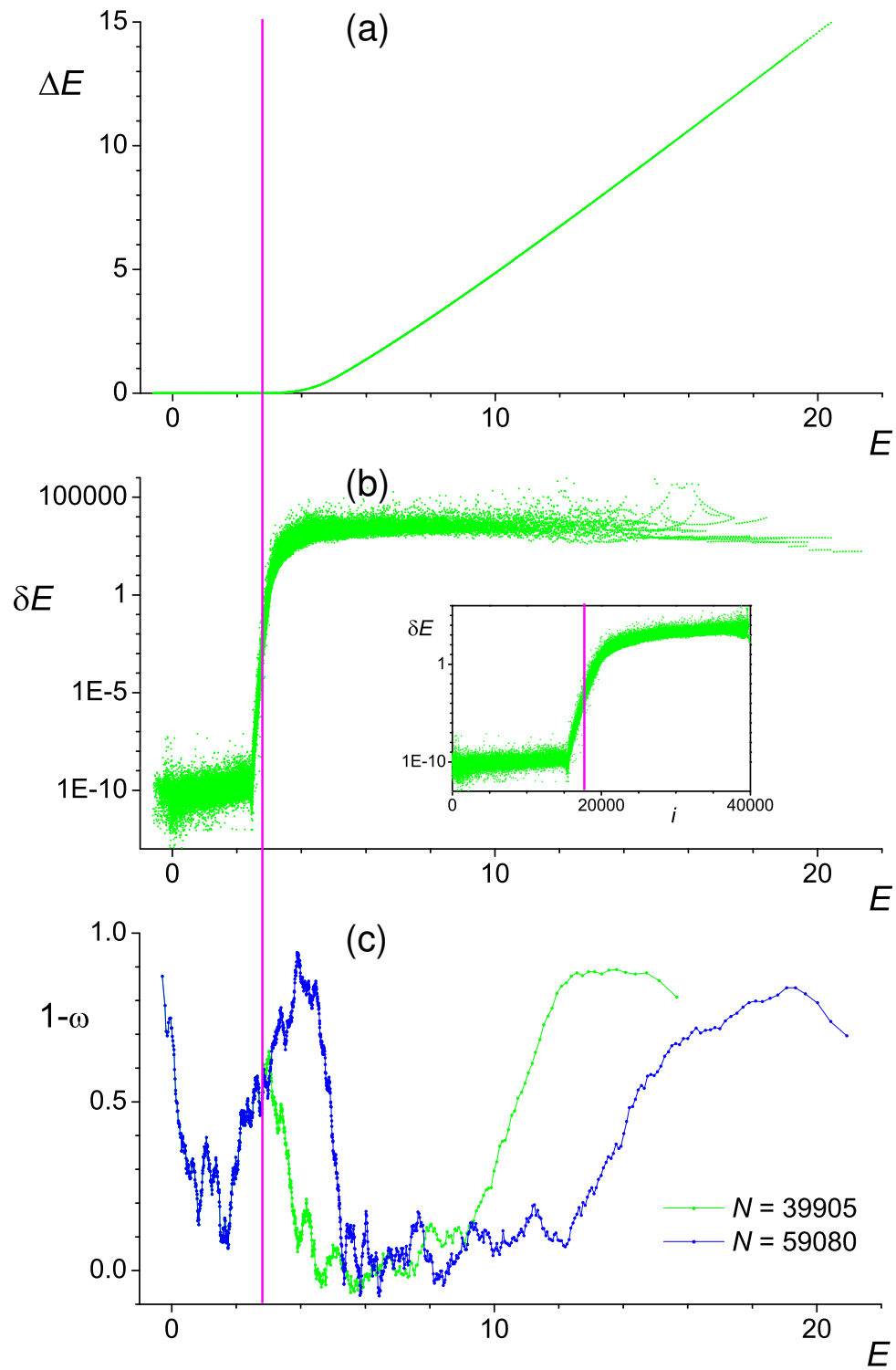
- Nejprve minimalizujeme stopu matice Hamiltoniánu před diagonalizací vzhledem k parametru A_{osc} . Tak získáme hodnotu A'_{osc} .
- Optimální hodnota leží v intervalu

$$\frac{1}{2}A'_{\text{osc}} \leq A_{\text{osc}}^{(o)} \leq \frac{2}{3}A'_{\text{osc}}, \quad (2.61)$$

přičemž pro rozsáhlé báze se více přiklání k pravé části intervalu.



Obrázek 2.10: Test konvergence diagonalizace pro dvě báze velikostí $d_1 = 19360$ a $d_2 = 39905$ v GCM systému ve škálování $A = -1$ s parametry $B = 0.62$, $\hbar = 0.005$. (a) zobrazuje absolutní rozdíl energií obou souborů, (b) relativní rozdíl. (c) ukazuje závislost Brodyho parametru pro oba dva soubory.



Obrázek 2.11: Totéž jako u obrázku 2.10, avšak pro báze velikostí $d_1 = 39905$ a $d_2 = 59080$.

2.3.4 Brodyho parametr a srovnání klasické a kvantové dynamiky

Nyní přikročíme k prezentaci výsledků kvantové verze GCM. Ukážeme závislost míry chaosu, popsané Brodyho parametrem, na energii a na parametrech modelu a srovnáme ji s klasickou mírou f_{reg} . Jelikož podobné výsledky publikuje práce [Str09a] (příloha IV) bude diskuze výsledků stručná. Brodyho parametr zde budeme počítat pomocí χ^2 fitu, aplikovaného na odhad distribuční funkce Brodyho rozdělení (1.60), zatímco v příloze IV používáme lineární aproximaci hodnot získaných speciální transformací vzdáleností nejbližších hladin. Použití rozdílných metod umožňuje jejich srovnání.

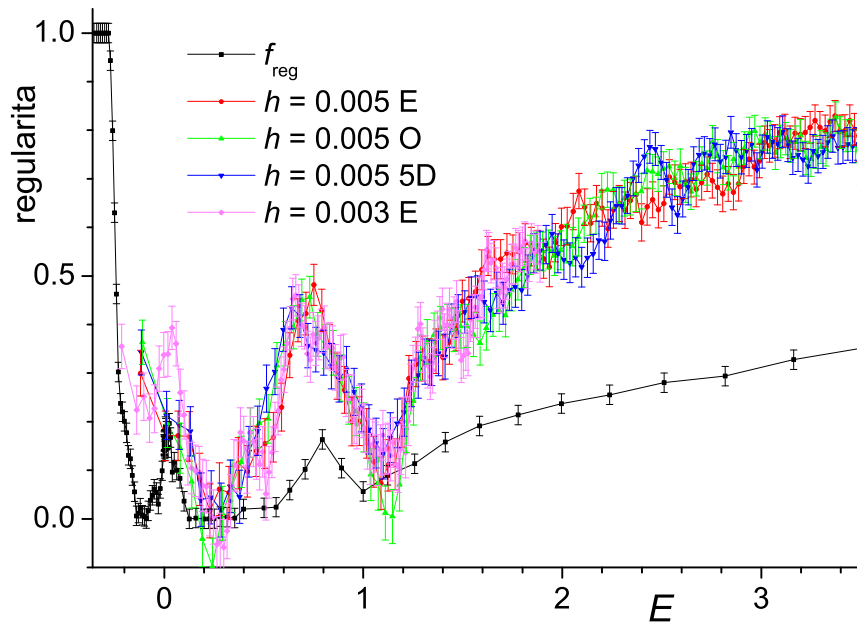
Postupy, které budeme aplikovat, jsou uvedeny v části 1.3.5 týkající se kvantového chaosu ve smíšených systémech. V konkrétním případě geometrického modelu budeme postupovat takto:

1. Nejprve spočítáme vlastní hodnoty matice Hamiltoniánu v bázi čítající přibližně 60000 stavů.
2. Ze získaných vlastních stavů vybereme pouze ty, které dobře konvergují (těch je v počítaných případech přibližně 30000).
3. Interval nejnižších 1000 po sobě jdoucích konvergujících energií unfoldujeme pomocí polynomiálního unfoldingu (v našem případě je dostatečně hustého spektra stačí uvažovat polynom 3. stupně) a fitováním podle vztahu (1.59) nalezneme odhad Brodyho parametru ω při energii, která leží ve středu intervalu. Směrodatnou odchylku určíme z obrázku 1.13.
4. Posuneme počátek intervalu s krokem 200 k vyšším konvergujícím energiím a bod 3 opakujeme pro všechny konvergující hladiny.

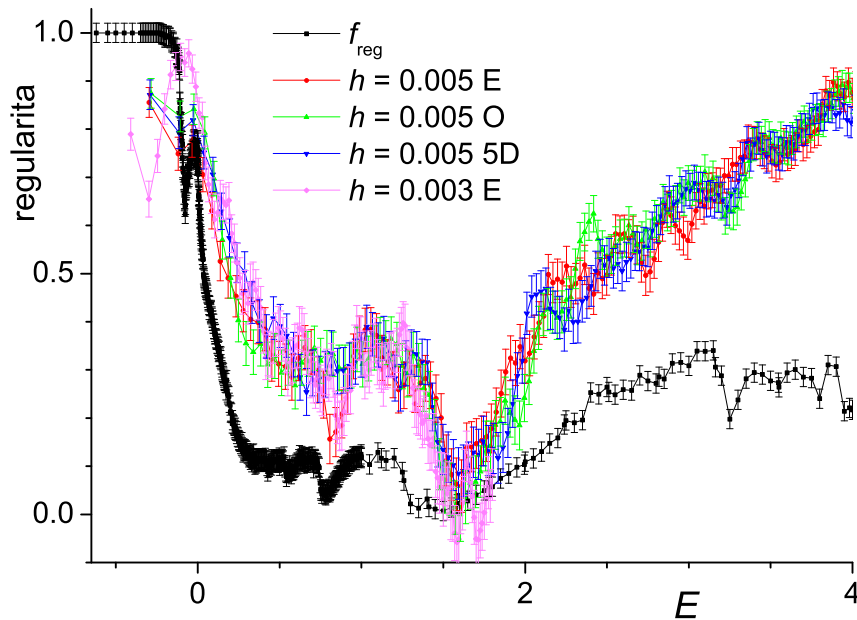
Pro 5D systém a 2D systém v sudém i lichém kvantování a pro různé hodnoty Planckovy konstanty jsou doplňky $1 - \omega$ Brodyho parametru uvedeny v obrázcích 2.12–2.14 pro $B = 0.24$, $B = 0.62$ a $B = 1.09$ ve škálování $A = -1$ modelu GCM a dále v obrázcích 2.15 a 2.16 pro $A = 0$, $A = 0.25$ ve škálování $B = 1$ (poslední zmiňovaný případ odpovídá fázovému přechodu, viz část 2.1). Pro přímé srovnání s klasickým případem je v grafech uvedena hodnota f_{reg} získaná vertikálními řezy z mapy 2.5. Zobrazená chyba odpovídá hornímu odhadu $\Delta f_{\text{reg}} = 0.02$, skutečná chyba klasické míry regularity bude nižší. Na uvedených obrázcích pozorujeme dobrý kvalitativní souhlas klasické i kvantové míry regularity. Extrémy závislosti $f_{\text{reg}}(E)$ korespondují s extrémy $1 - \omega(E)$. Z toho lze usuzovat na monotónnost vztahu mezi oběma mírami. KVantitativně se nachází Brodyho parametr systematicky výše, neshoduje se s klasickou mírou ani v mezích chyby. Shoda však není očekávána, jelikož obě míry jsou definovány zcela nezávisle a navíc, jak bylo uvedeno, Brodyho parametr je uměle zavedený a jeho jedinou matematickou motivací je interpolovat mezi Poissonovým a Wignerovým rozdělením. Nadhodnocení regularity Brodyho parametrem je pozorováno i v práci [Gom05].

2.3.5 $1/f$ šum

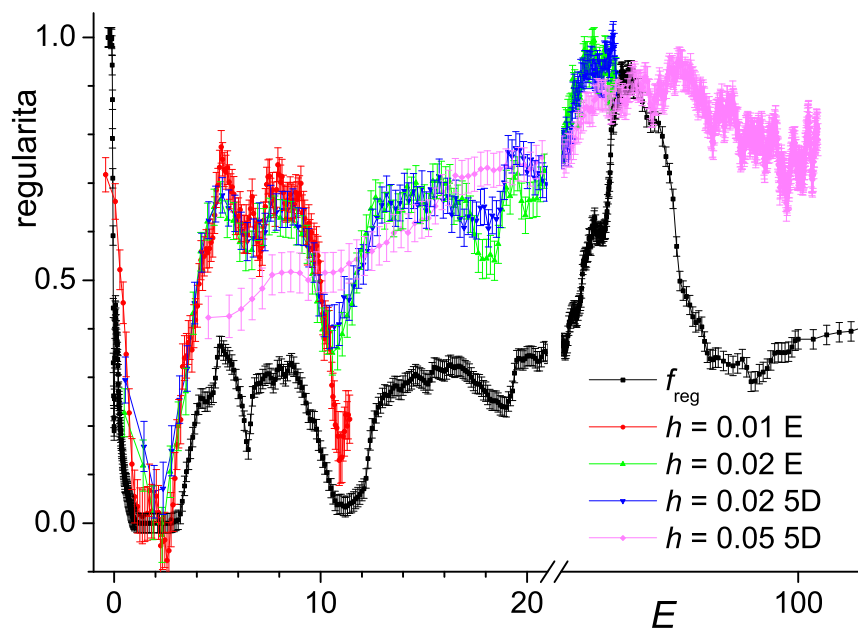
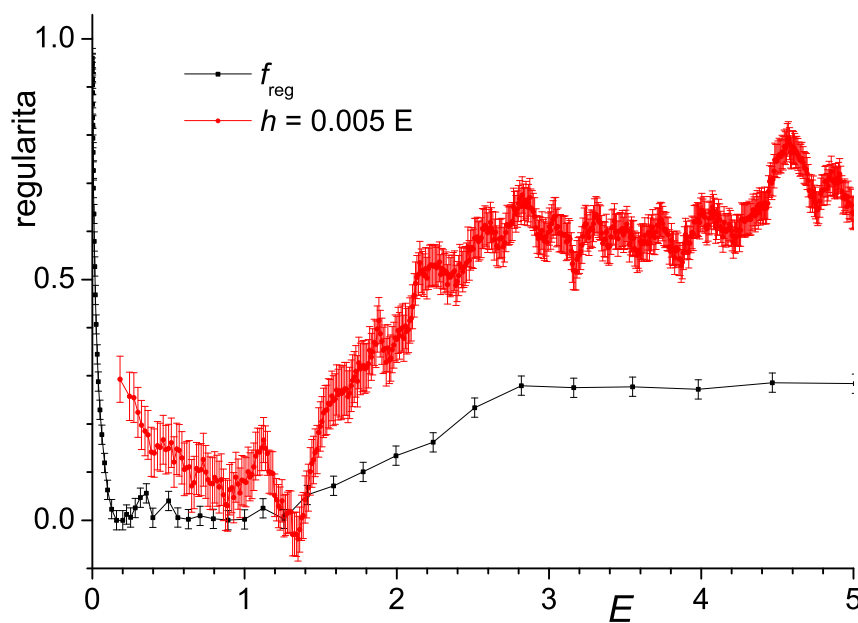
Metoda $1/f$ šumu byla zavedna v části 1.3.7. Při výpočtu hodnoty parametru α , který určuje chaocitu této metody, budeme sledovat podobný postup jako při určování Bro-

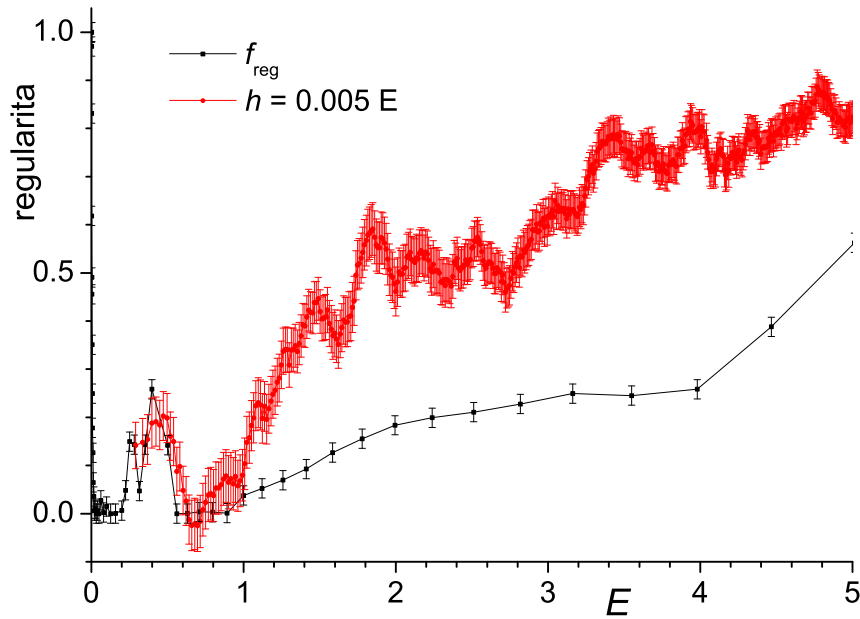


Obrázek 2.12: Srovnání klasické míry f_{reg} a kvantové míry $1 - \omega$ regularity pro GCM systém ve škálování $A = -1$ s parametrem $B = 0.24$.



Obrázek 2.13: Stejně jako obrázek 2.12, avšak pro parametr $B = 0.62$.

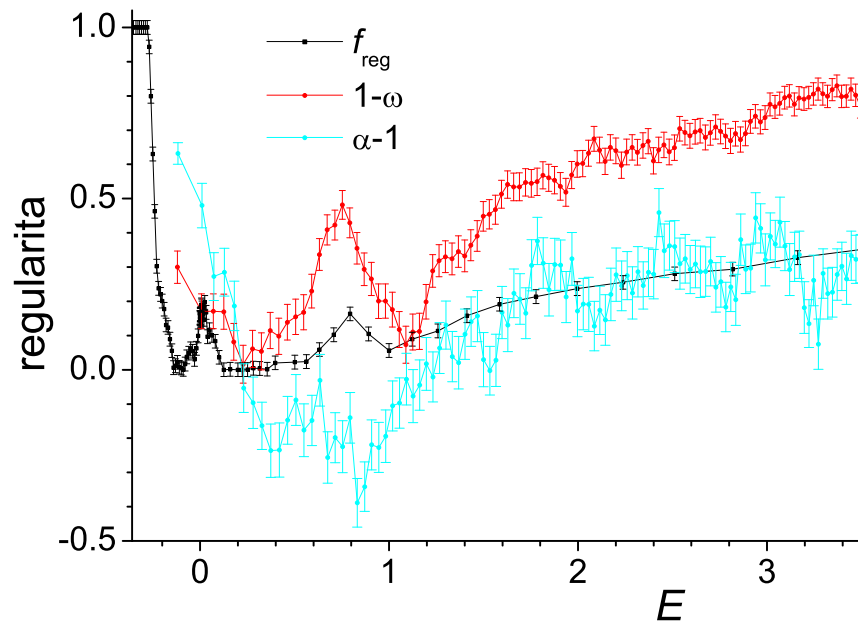
Obrázek 2.14: Stejně jako obrázek 2.12, avšak pro parametr $B = 0.109$.Obrázek 2.15: Stejně jako obrázek 2.12, avšak ve škálování $B = 1$ s parametrem $A = 0$.



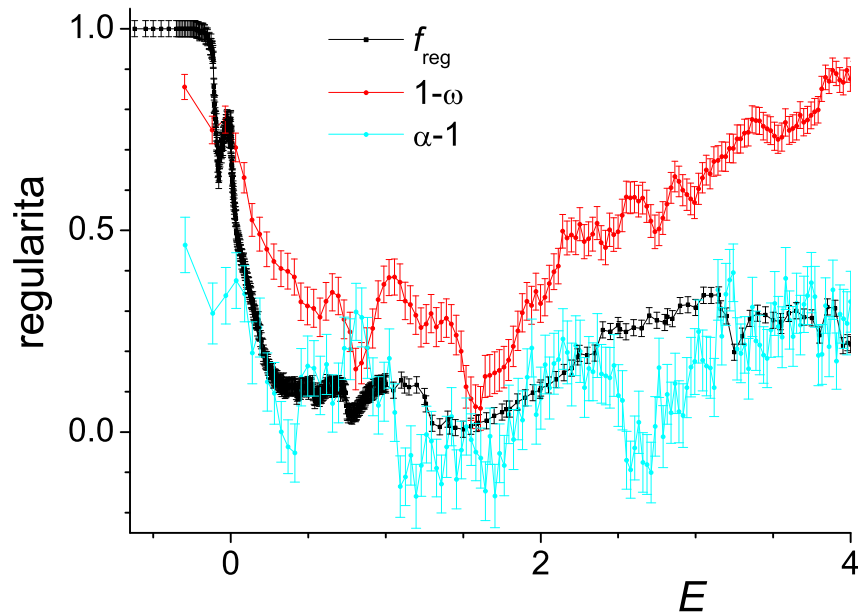
Obrázek 2.16: Stejně jako obrázek 2.12, avšak ve škálování $B = 1$ pro parametr $A = 0.25$ (fázový přechod).

dyho parametru. Opět budeme uvažovat interval sousedních hladin a posouvat jej s krokem 200 podél celého spektra. Do intervalu tentokrát umístíme 1024 hladin, abychom co nejefektivněji využili kapacity rychlé Fourierovy transformace. Po unfoldování spektra určíme časovou řadu δ_k (1.62) a její výkonové spektrum $S(f)$ (1.63). Zobrazíme-li toto spektrum v logaritmicko-logaritmické závislosti, získáme lineární regresí parametr α (1.64) včetně jeho směrodatné odchylky.

Na obrázcích 2.17 a 2.18 jsou uvedeny energetické závislosti veličiny $\alpha - 1$ (tyrkysově) a pro srovnání je zopakována křivka klasické míry regularity f_{reg} (černě), a doplněk Brodyho parametru (červeně). Jako chyby veličiny $\alpha - 1$ jsou uvedeny pouze směrodatné odchylky získané z lineární regrese. To však není jediná chyba, která vstupuje do hry. V sekci 1.3.7 bylo uvedeno, že vypočtené hodnoty výkonového spektra jsou jen výběrovou hodnotou ze souboru časových řad, které přísluší hodnota α . Je tedy samo náhodnou veličinou se střední hodnotou a disperzí [proto je nutné středovat přes soubor časových řad, viz rovnice (1.64)]. Zatímco u biliárdů je toto středování proveditelné díky tomu, že jakákoliv část spektra přísluší stejnému souboru časových řad s daným α , v případě GCM, kde α závisí na energii a je pro každý úsek spektra jiná, středování provést nelze. Skutečná chyba $\Delta(\alpha - 1)$ je tedy vyšší, než jak je zobrazena na obrázcích 2.17 a 2.18. Může dokonce zahrnout odchylky od křivek pro zbylé dvě míry, se kterými nedochází v ilustrovaných případech ani ke kvalitativnímu souhlasu. Křivka získaná metodou $1/f$ šumu dokonce proniká hluboko do záporných hodnot a opouští tak interval $(0; 1)$, který se rozpíná mezi zcela chaotickým a zcela regulárním případem. Nemožnost středování přes soubory tedy znemožňuje použití metody $1/f$ šumu jako míry regularity v systémech s energetickou nebo parametrickou závislostí chaotičnosti.



Obrázek 2.17: Srovnání měr regularity f_{reg} , $1-\omega$ a $\alpha-1$ v systému GCM se škálováním $A = -1$ s parametrem $B = 0.24$ a ve 2D sudém kvantování s Planckovou konstantou $\hbar = 0.005$.



Obrázek 2.18: Stejně jako obrázek 2.17, avšak pro parametr $B = 0.62$.

2.3.6 Peresovy mříže

V poslední části této kapitoly ukážeme Peresovy mříže, které umožňují vizualizovat komplexitu a vývoj chaotických a regulárních oblastí při změnách parametrů v kvantové verzi GCM. Podobně, jako byla v sekci 2.2.4 znázorněna kompletní mapa klasického chaosu v geometrickém kolektivním modelu (viz obrázek 2.5), zde s podobnou úplností uvedeme kvantové Peresovy mříže. Peresovým mřížím v GCM se věnuje publikace [Str09b] (příloha V), kde je kromě obsáhlé diskuze demonstrována závislost vzhledu mříží na použitém kvantování, na velikosti Planckovy konstanty, ukázána nezávislost regulárních a chaotických oblastí v mříži na volbě Peresova operátoru a podrobně diskutováno několik zajímavých oblastí, jmenovitě oblast narušení integrability $B \approx 0$ a oblast linie regularity $B \approx 0.62$ při škálování $A = -1$ GCM systému. Tato sekce bude sloužit jako doplňkový obrazový materiál k uvedené příloze.

Budeme uvažovat dva odlišné Peresovy operátory:

1. Operátor neintegrabilní poruchy

$$H' = \beta^3 \cos 3\gamma, \quad (2.62)$$

který udává vliv poruchy na jednotlivé stavy a který je nulový v integrabilním případě, jak je ukázáno v příloze V.

2. Casimirův invariant $O(2)$, resp. $O(5)$ algebry omezený na nulové rotace [nulový Casimirův operátor podalgebry $O(3) \subset O(5)$] pro 2D, resp. 5D. kvantování (operátor seniority)

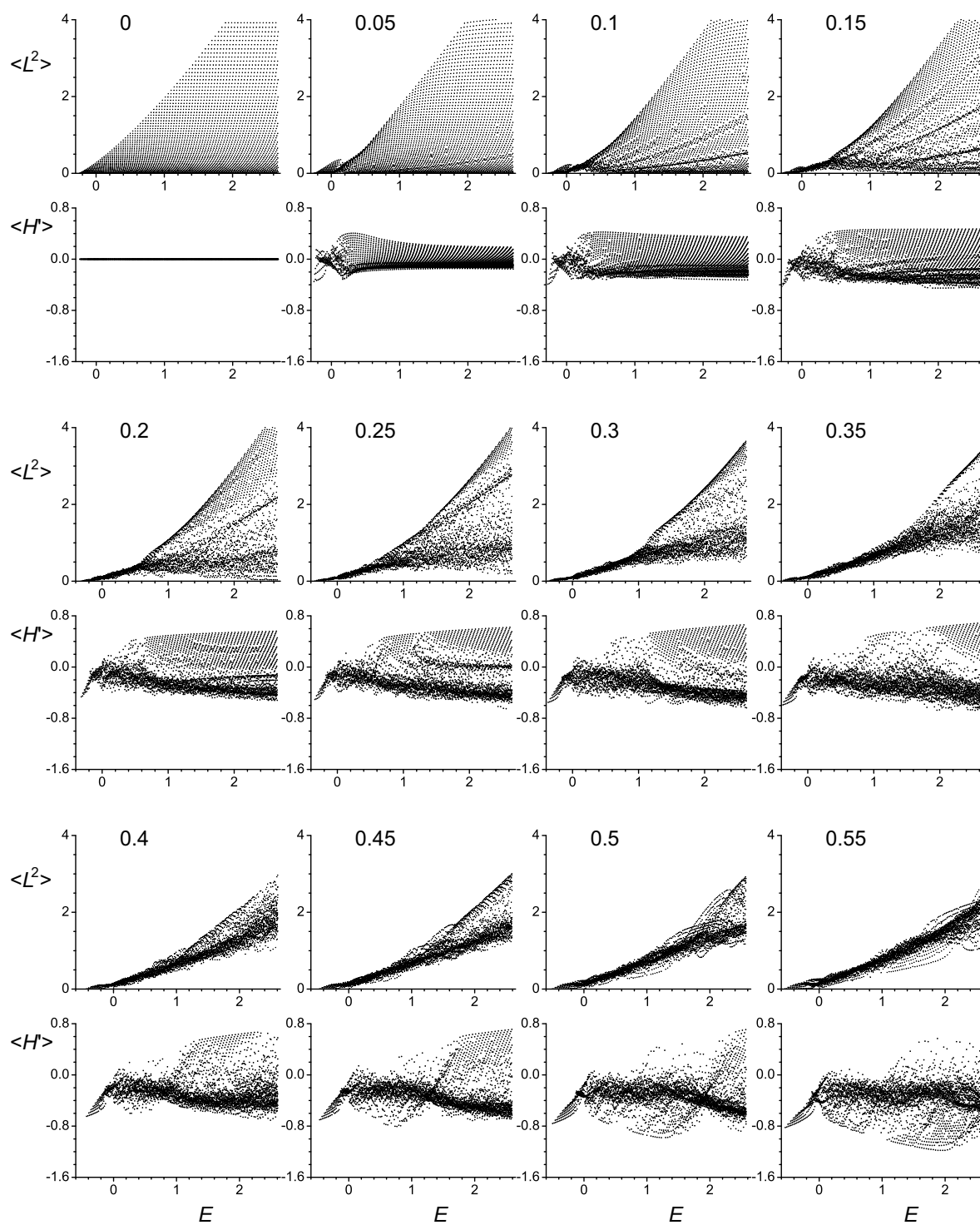
$$L_{2D}^2 = \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \quad (2.63)$$

$$L_{5D}^2 = \hbar^2 \frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma}. \quad (2.64)$$

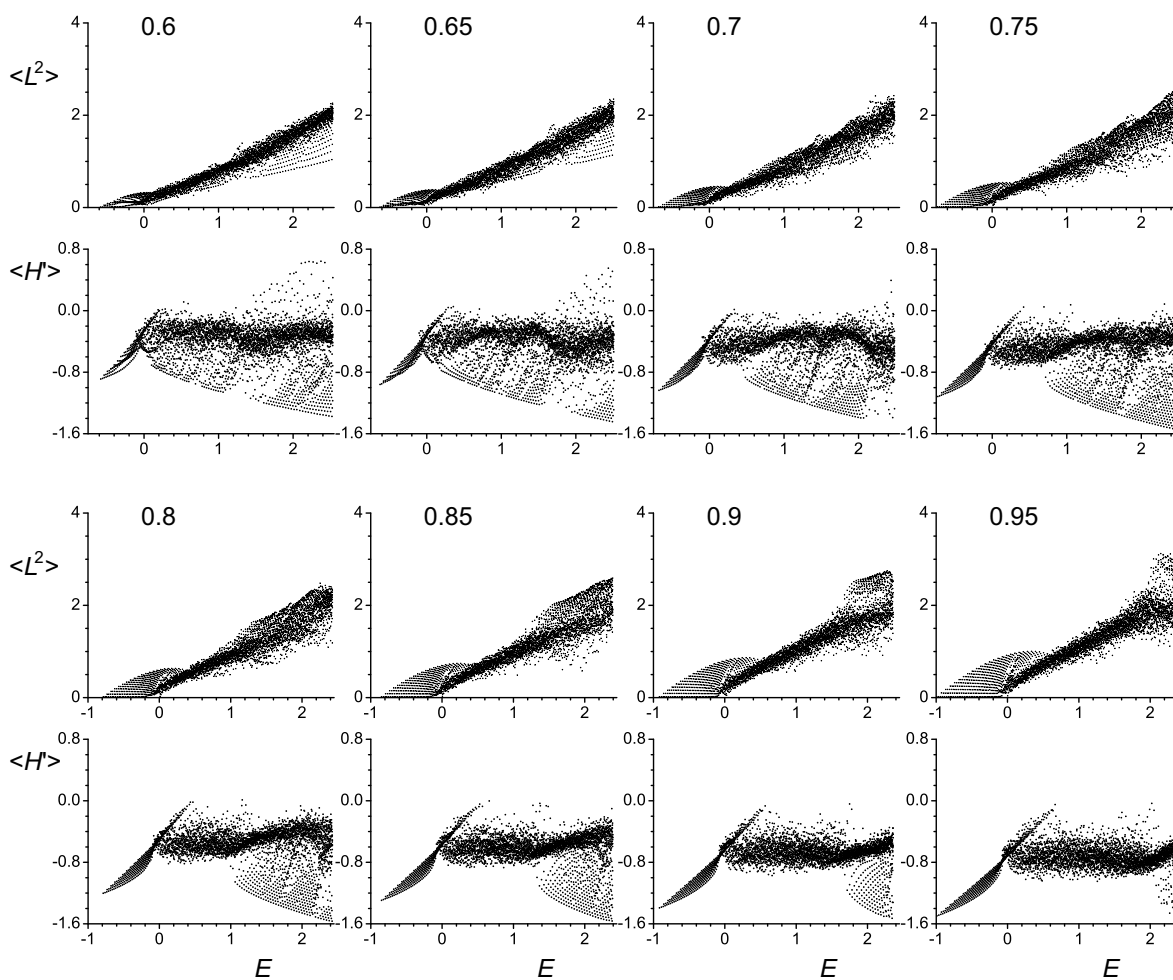
Jelikož lze algebraicky vyjádřit maticové elementy těchto operátorů pro vlastní stavy harmonického oscilátoru tvořící bázi pro diagonalizaci GCM, je výpočet Peresových středních hodnot nenáročnou numerickou záležitostí.

Obrázky 2.19–2.23 obsahují Peresovy mříže se 4000 body pro vybrané hodnoty parametrů podél celé cesty (2.12), vypočítané pro 2D kvantování geometrického modelu s Planckovou konstantou $\hbar = 0.01$. Zobrazeny jsou ve všech případech mříže se středními hodnotami obou Peresových operátorů $\langle L_{2D}^2 \rangle$, $\langle H' \rangle$. Důležitá je souvislost regulárních částí mříže se vzrůstem regularity na dané energii, kterou lze srovnat s mapou regularity 2.5 nebo s obrázky 2.12–2.14 a která je diskutována v příloze V. Pro $B = 0$ je systém integrabilní, čemuž odpovídá zcela pravidelná mříž (navíc platí $\langle H' \rangle \equiv 0$). Rostoucí neintegrabilní porucha řízená parametrem B zpočátku způsobí pouze lokalizované deformace struktury mříže, avšak další vzrůst vede k rozpadu většiny pravidelných struktur, viz hodnoty $B \in (0.2, 0.5)$. Očekávaný zlom tohoto chování okolo $B \approx 0.6$, související s linií regularity, je pozorován na obrázku 2.20. Zejména v oblasti nízkých energií se v mřížích začnou objevovat nové regulární ostrovy. Ty však opět zmizí pro vyšší hodnoty B .

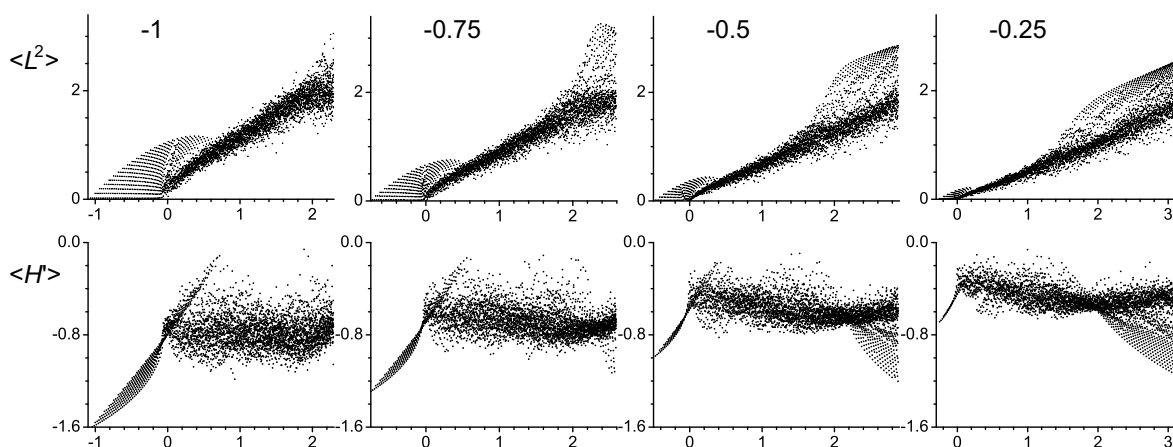
Regulární oblasti pro nízké energie mizí i při rostoucím A ve škálování $B = 1$, viz obrázky 2.21 a 2.22. Podle obrázku 2.5 by měla být nejvýraznější chaoticita pozorována

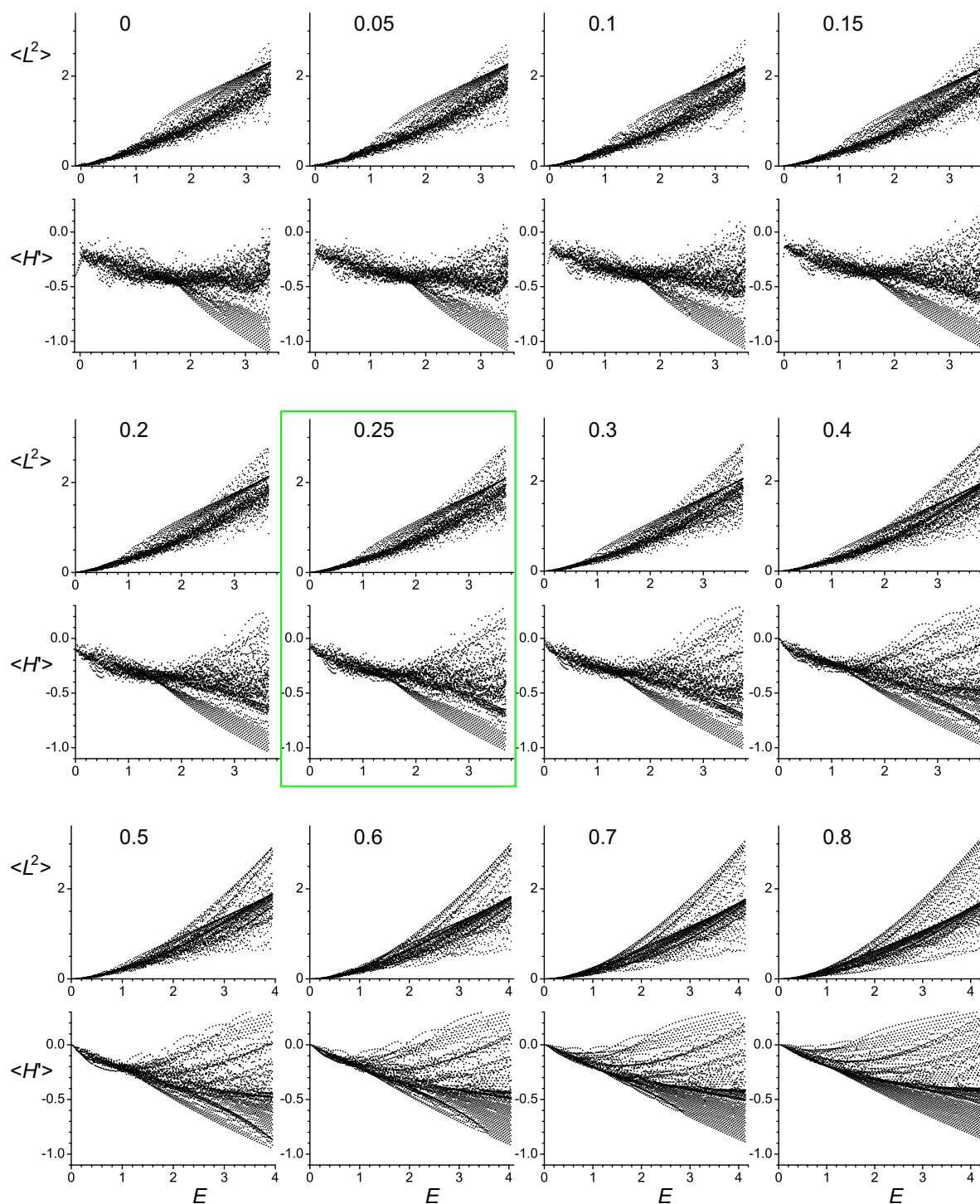


Obrázek 2.19: Peresovy mříže pro operátory L^2 a H' ve 2D sudé verzi kvantového geometrického kolektivního modelu ve škálování $A = -1$. Hodnoty parametru B jsou vždy uvedeny u grafu pro operátor L^2 , těsně pod ním se nachází odpovídající graf pro operátor H' . Zobrazeno je 4000 nejnižších hladin vypočítaných pro $\hbar = 0.01$.

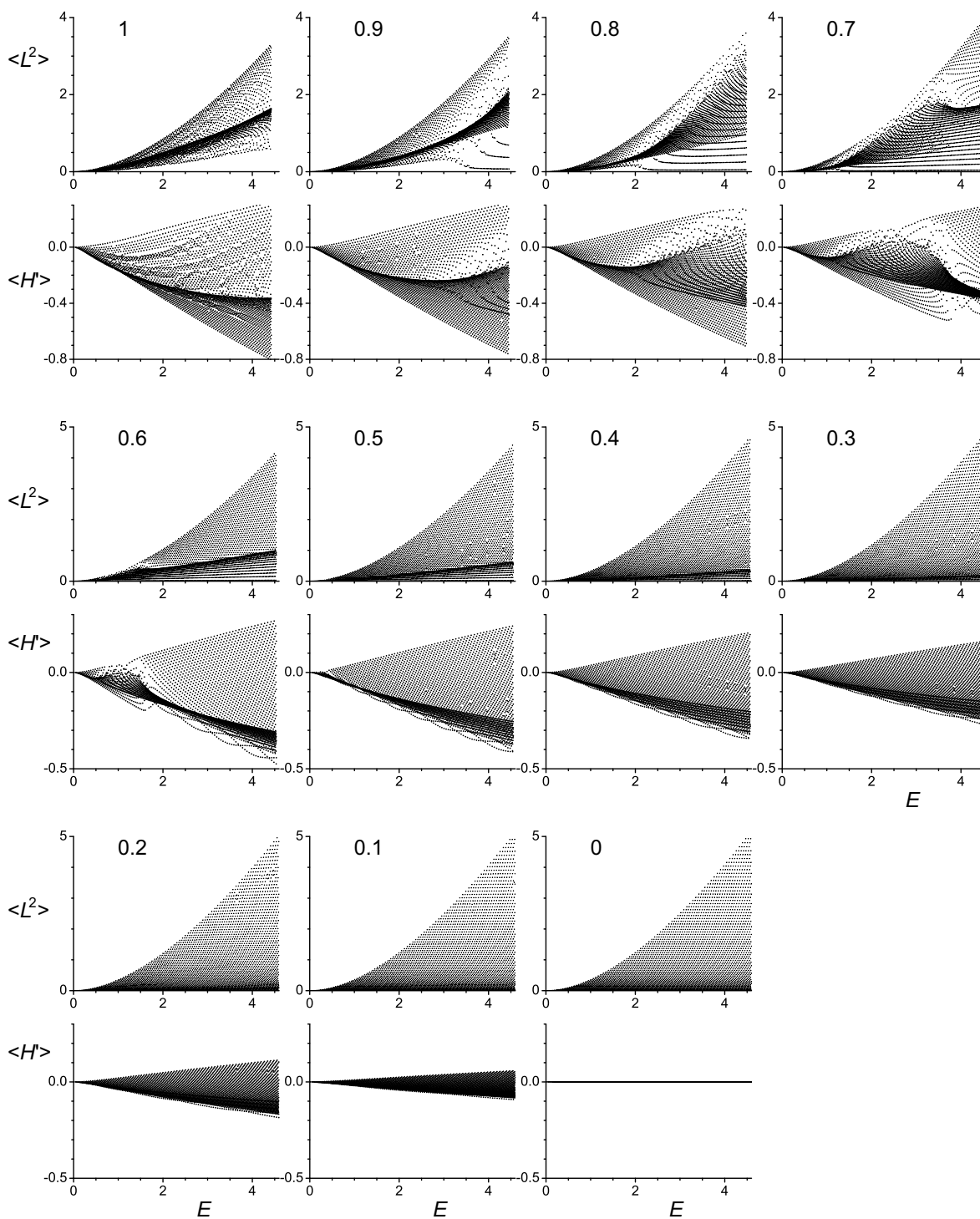


Obrázek 2.20: Pokračování obrázku 2.19.

Obrázek 2.21: Stejně jako obrázek 2.19, avšak ve škálování $B = 1$ pro A záporné. Hodnoty parametru A jsou opět uvedeny v záhlaví odpovídajících si dvojic obrázků.



Obrázek 2.22: Stejně jako obrázek 2.21, avšak ve škálování $B = 1$ pro A kladné. Zeleně je orámována situace odpovídající fázovému přechodu.



Obrázek 2.23: Stejně jako obrázek 2.19, avšak ve škálování $A = 1$. V záhlaví odpovídajících si dvojic obrázků jsou uvedeny hodnoty parametru B .

v oblasti fázového přechodu (na obrázku 2.22 je vyznačena zeleným rámečkem), ovšem pro tak nízké energie, které již leží mimo rozlišovací schopnost uvedených řezů. Další růst A s sebou přináší novou regulární oblast, která se z vysokých energií posouvá směrem k nižším.

Zbývá vyšetřit poslední oblast škálování $A = 1$. Podle obrázku 2.5 je tato oblast v klasickém případě již velice regulární. To pozorujeme i v kvantovém případě na obrázku 2.23. Zejména pro $B < 0.5$ se ve struktuře mříže vyskytují pouze izolované „dislokace“. Poznamenejme, že přechod od integrabilního $B = 0$ k nepatrně porušenému neintegrabilnímu případu s malým B se výrazně kvalitativně liší v případech $A = -1$ a $A = 1$. Zatímco v prvním z nich (viz obrázek 2.19 a rovněž příloha IV) dojde ke skokové změně ve struktuře mříží, projevující se v mříži pro $\langle L^2 \rangle_{2D}$ jejím roztržením v oblasti energií $E \in (0, 0.5)$ a v mříži pro $\langle H' \rangle$ okamžitým objevením vysokých hodnot, v případě $A = 1$ je pozorován spojitý přechod s postupným pomalým objevováním deformací mříže. Pro $A < 0$ je totiž na polopřímce $B = 0$ fázový přechod z protáhlého do zploštělého deformovaného tvaru (viz diskuze týkající se obrázku 2.1), přičemž samotný případ $B = 0$ odpovídá situaci, kdy potenciál nezávisí na úhlu γ a přitom $\beta_{\min} > 0^{14}$, tj. v základním stavu není preferována žádná hodnota parametru deformace γ . Pro $A > 0$ a $B = 0$ k žádnému fázovému přechodu nedochází, základní stav leží v $\beta = 0$ a odpovídá tedy sférickému tvaru.

Srovnání s kompletní mapou klasické regularity není na základě uvedených mříží úplné. Mříže umožňují sledovat rozmístění hladin mezi chaotické a regulární oblasti pouze v omezeném energetickém intervalu, který zdaleka nepokrývá rozsáhlou energetickou škálu obrázku 2.5. Přesto již na tomto malém intervalu pozorujeme dobrý souhlas mezi růstem regularity a velikostí regulární části Peresovy mříže. Změnou velikosti Planckovy konstanty lze energetický interval mříží dále rozšířit na vyšší energie (jejím zvětšením) či získat detaily energií nízkých (jejím snížením).

¹⁴Tzv. deformovaný γ -soft případ.

Kapitola 3

Shrnutí

Tato práce se zabývá studiem projevů klasického a kvantového chaosu v systému geometrického kolektivního modelu atomových jader v případě nulového momentu hybnosti (model popisující vibrační stupně volnosti jader pro $\mathbf{J} = 0$). Model je využíván i v ne-realistickém režimu velmi vysokých excitací, kdy slouží jako platforma pro testování klasického a kvantového chaosu.

První kapitola práce začíná úvodem, který ilustruje základní projevy chaosu ve fyzice. Následuje popis metod, které umožňují zobrazit a měřit chaos v klasických a kvantových systémech. Mezi nejdůležitější převzaté metody studia *klasického* chaosu patří:

- Grafická metoda Poincarého řezů.
- Metoda vyrovnávání směrů dvojice odchylek (SALI) pro odlišení regulárních a chaotických trajektorií.
- Geometrická metoda, která je aplikací metod diferenciální geometrie na klasické systémy popsané jednoduchou Hamiltonovou funkcí a která poskytuje jednoduché kritérium pro stabilitu či nestabilitu klasického systému.

Metodu SALI jsme zkombinovali s metodou Poincarého řezů a tím jsme vytvořili efektivní nástroj na určení míry regularity klasického systému se dvěma stupni volnosti. Míru jsme označili f_{reg} .

Z kvantových metod používáme:

- Statistiku vzdáleností nejbližších hladin kvantových spekter a s ní související Brodyho rozdělení s parametrem ω , jímž lze měřit míru regularity kvantového systému.
- Metodu $1/f$ šumu, poskytující svým parametrem α alternativní míru regularity k Brodyho parametru.
- Peresovu metodu, která umožňuje vizuálně odlišit skupiny regulárních hladin od hladin chaotických a která poskytuje hlubší pohled na kvantovou dynamiku integrabilních i neintegrabilních systémů.

Kapitola 2 obsahuje aplikace výše uvedených metod na geometrický kolektivní model. Její první část se věnuje zavedení modelu, ukazuje fázovou strukturu a možnosti škálování, které umožňují popsat všechny možné konfigurace modelu pomocí jednoho

parametru τ v případě klasickém, resp. pomocí dvou parametrů (τ, κ) v případě kvantovém.

Druhá část kapitoly 2 se zaměřuje na klasickou verzi geometrického modelu, explicitně uvádí vztahy pro pohybové rovnice a Jacobiho matici, kterou využívá SALI metoda. Velký prostor je věnován aplikaci geometrické metody, jejíž studie v rámci GCM prozatím nebyla publikována. Je ukázáno, že kritérium přechodu od stabilní k nestabilní dynamice souvisí se zakřivením hranice kinematically dostupné oblasti, přičemž konkávní hranice odpovídá nestabilitě.

Vyvrcholením této části je zobrazení kompletní mapy regularity GCM systému v závislosti na volném parametru a energii. Mapa ukazuje na vysokou rozmanitost systému a dovoluje pozorovat struktury, které jednotlivé závislosti f_{reg} na energii nebo parametru nedovolují. Na této mapě je též demonstrována přesnost geometrické metody. Ukazuje se, že v blízkosti hranice, která má oddělovat oblasti s regulární dynamikou od oblastí chaotických, metoda selhává. Na větších škálách však poskytuje dobré vodítko k určení charakteru dynamiky.

Zbytek druhé části kapitoly 2 je věnován rozšíření kinetického členu GCM tak, aby kompenzoval nefyzikální chování momentu setrvačnosti a aby se přiblížil kinetickému členu modelu interagujících bosonů. Na příkladu závislosti regularity při nulové energii na volném parametru systému je ukázáno, že modifikace kinetických členů nenaruší významnou oblast regularity, která je společná oběma kolektivním modelům.

K této druhé části kapitoly 2 neoddělitelně patří následující přílohy:

- Příloha I, odpovídající článku [Cej04], ukazuje (i) komplexní závislost regularity f_{reg} na vnějším parametru modelu při nulové energii, která je ilustrována rovněž pomocí Poincarého řezů, a (ii) závislost regularity na energii pro několik hodnot parametrů modelu, přičemž klade důraz na podrobné zobrazení okolí nulové energie, ve kterém regularita vykazuje prudké změny. Je zobrazen rovněž logaritmický nárůst regularity pro vysoké energie. K výpočtu f_{reg} zde používáme metody, která vychází z Poincarého řezů, ale ne ze SALI metody; regulární a chaotické trajektorie jsou rozlišovány podle toho, jak velkou plochu protnou na Poincarého řezu. Diskutujeme souvislost regularity v bodě parametrického prostoru, ve kterém se systém vykazuje kritickou dynamickou symetrií $X(5)$.
- Příloha II, ve které je přetištěn článek [Str06], podrobně odvozuje z Hamiltoniánu geometrického modelu pohybové rovnice, diskutuje fázovou strukturu modelu a explicitně uvádí vztahy pro různá škálování. Věnuje se studiu nerotujícího případu, avšak zkoumá též vliv rotace kolem pevné osy na regularitu systému. Ukazuje, že v klasické dynamice není přechod mezi rotujícím a nerotujícím případem spojitý, což souvisí se singulárním chováním momentu setrvačnosti pro $\beta = 0$. Příloha obsahuje ilustrace závislosti regularity na parametru a na energii, které byly uvedeny v příloze I, a zobrazuje je v jiném škálování. To umožňuje ukázat regularitu pro jiné hodnoty parametrů. Pozornost je věnována zejména oblasti fázového přechodu z deformovaného do sférického tvaru. Demonstrujeme také těsnou souvislost mezi konkavitou hranice kinematically dostupné oblasti a chaoticitou systému a poprvé zmiňujeme vztah mezi výrazným maximem regularity v geometrickém kolektivním modelu a linií regularity v příbuzném modelu interagujících bosonů.

- Příloha III, která odpovídá článku [Str07], uvádí rozšíření kinetického členu Hamiltoniánu geometrického modelu (v hlavním textu je toto rozšíření označeno jako typ II) a vypisuje explicitní vztahy pro jeho škálování. Všímá si pozoruhodných vztahů mezi hodnotami volného parametru, na kterých se nachází maxima regularity při nulové energii. Tyto hodnoty jsou navzájem velmi přesně v poměrech celých čísel.

Třetí část kapitoly 2 se obrací ke kvantové verzi geometrického modelu. Zavádí dva různé způsoby kvantování (označili jsme je 2D a 5D), podrobně se věnuje technickým aspektům diagonalizace rozsáhlých matic Hamiltoniánu v odpovídající bázi a zkoumá konvergenci hladin v závislosti na velikosti báze. Poté srovnává klasickou míru f_{reg} s mírou regularity spočítanou ze spektrálních statistik pomocí Brodyho parametru a s mírou regularity danou exponentem $1/f$ šumu. Zatímco Brodyho parametr dává dobrý kvalitativní souhlas s klasickou mírou, a tím potvrzuje platnost Bohigasovy hypotézy [Boh84], ukazuje se, že $1/f$ metodu nelze kvůli špatné statistice v případě GCM použít. Zbývající prostor kapitoly o geometrickém modelu je věnován kompletnímu přehledu Peresových mříží pro dva různé Peresovy operátory.

K třetí části kapitoly 2 patří následující přílohy:

- Příloha IV, která obsahuje text článku [Str09a], pojednává ve velké šíři o kvantování modelu a uvádí explicitní výrazy pro výpočet maticových elementů Hamiltonovy matice v systému GCM a vzorce pro vlnové funkce. Zobrazuje rozdílnost spekter a vlnových funkcí při 2D sudém, 2D lichém a 5D kvantování a tuto skutečnost dává do kontrastu se shodou spektrálních statistik, reprezentovaných Brodyho parametrem ω . K výpočtu ω užívá jinou metodu, než s jakou je počítáno v hlavním textu, a podrobně diskutuje vztah mezi Brodyho parametrem a hustotou hladin, která je úměrná „kvantovému“ parametru modelu κ .
- Příloha V, odpovídající článku [Str09b], začíná podrobným popisem Peresovy metody. Následně na Peresových mřížích a hustotách vlnových funkcí ilustrujeme vliv poruchy řízené parametrem B zavedené integrabilního $B = 0$ režimu. Na příkladech vlnových funkcí vysoce excitovaných hladin pocházejících jak z regulární, tak z chaotické části mříže demonstrujeme, že hladina přísluší regulární nebo chaotické oblasti nezávisle na volbě Peresova operátoru ke konstrukci mříže. Ukazujeme souvislost mříží s klasickou mírou chaosu (růst regularity v klasickém případě souvisí s mohutnější regulární strukturou v mříži) a počítáme i klasickou analogii Peresova invariantu, která rovněž umožňuje porovnat klasický a kvantový případ. Na závěr se zabýváme oblastí v okolí linie regularity (kvaziregulární oblastí) a ukazujeme, že v této oblasti začínají β a γ vibrace, do té doby přítomné pouze hluboko v minimech potenciálu, pronikat do oblasti kladných energií.

V dodatcích jsme uvedli jednak vztahy použité pro výpočet f_{reg} v systému IBM, který byl proveden pro srovnání dynamiky obou příbuzných kolektivních modelů (dodatek A), jednak návod k použití programu, který umožňuje provádět veškeré výpočty, jejichž výsledky jsou uvedeny v této práci (dodatek B).

Hlavní výstupy mé doktorské práce jsou články přetištěné v přílohách, které byly publikovány v recenzovaných časopisech. Mimo hlavní linii předloženého textu leží časopisecké publikace [Mac07a, Mac07b, Mac09], které srovnávají dynamiku geometrického modelu a modelu interagujících bosonů, a články [Cej08, Cej09a], věnované

studiu kvantových fázových přechodů. Mé práce se také týkají příspěvky v konferenčních sbornících [Cej06, Cej09b, Str09c]. Velká část výsledků je rovněž vystavena na webu [www].

I přes dlouhé a podrobné studium modelu stále existují nezodpovězené otázky. Jedná se o původ ostrých maxim na energii $E = 0$, zmíněných v příloze III. Rovněž „žila“ regularity, která se objevuje ve škálování $B = 1$ na energii $E \approx 24$ a je zmíněna v diskuzi k obrázku 2.5, je pozoruhodný a zatím nevysvětlený jev. Na poli kvantového chaosu by bylo zajímavé pozorovat, jak se změní Peresovy mříže v případě, kdy systém začne rotovat. K analýze by v tomto případě bylo možné použít nově odvozené algebraické techniky diagonalizace obecného GCM Hamiltoniánu (viz například [Bae08]).

Geometrický kolektivní model v nerotujícím režimu se ukazuje jako výborný nástroj pro studium chaotické dynamiky a to díky své jednoduchosti a přitom bohatosti chování. V kvantové verzi umožňuje počítat rozsáhlé soubory hladin, což je důležitá vlastnost při studiu spektrálních statistik. Umožňuje testovat nové metody klasického a kvantového chaosu, čímž doplňuje široce používané systémy biliárdů či vázaných oscilátorů.

Příloha A

Klasická dynamika IBM

Tento dodatek přímo nesouvisí s hlavním textem práce. Jeho obsahem jsou vztahy pro výpočet klasické dynamiky modelu interagujících bosonů, které jsou implementovány v programu (viz dodatek B). Budou uvedeny v maximální stručnosti, jelikož jejich použití je naprosto stejné jako u modelu GCM 2.2. Výpočty byly použity v článku [Mac07a], kde je právě srovnávána klasická dynamika obou modelů—jednoduchého geometrického modelu a IBM. V něm jsou rovněž uvedeny další reference.

Hamiltonián IBM vyjádřený v dynamických souřadnicích (x, y, p_x, p_y) zní [Iac87]

$$H = a \tau_+ - b O^2 \beta^2 + c O r + \frac{d}{8} (4\sigma^2 + \tau_-^2). \quad (\text{A.1})$$

Pro zjednodušení jsme zavedli označení

$$\begin{aligned} a &\equiv \frac{\eta}{2} & c &\equiv -b \frac{\chi}{\sqrt{7}} \\ b &\equiv 2(1 - \eta) & d &\equiv -b \frac{2\chi^2}{7} \end{aligned}$$

$(\eta \in \langle 0; 1 \rangle)$ a $\chi \in \langle -\sqrt{7}/2; \sqrt{7}/2 \rangle$ jsou dva vnější parametry IBM systému). Dále definujeme veličiny

$$\begin{aligned} \beta^2 &\equiv x^2 + y^2 \\ p^2 &\equiv p_x^2 + p_y^2 \\ \tau_+ &\equiv x^2 + y^2 + p_x^2 + p_y^2 \\ \tau_- &\equiv -x^2 + y^2 - p_x^2 + p_y^2 \\ \sigma &\equiv xy + p_x p_y \\ O &\equiv \sqrt{1 - \frac{\tau_+}{2}} \\ r &\equiv x(2y^2 + \tau_-) + 2y p_x p_y. \end{aligned}$$

Pohybové rovnice v tomto označení mají tvar

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= p_x (2a + b\beta^2) + c \left(Os_1 - p_x \frac{r}{2O} \right) + d \left(p_y \sigma - p_x \frac{\tau_-}{2} \right) \\ \frac{dy}{dt} &= p_y (2a + b\beta^2) + c \left(Os_2 - p_y \frac{r}{2O} \right) + d \left(p_x \sigma + p_y \frac{\tau_-}{2} \right) \\ \frac{dp_x}{dt} &= -x [2a + b(\beta^2 - 2O^2)] - c \left(Os_3 - x \frac{r}{2O} \right) - d \left(y\sigma - x \frac{\tau_-}{2} \right) \\ \frac{dp_y}{dt} &= -y [2a + b(\beta^2 - 2O^2)] - c \left(Os_4 - y \frac{r}{2O} \right) - d \left(x\sigma + y \frac{\tau_-}{2} \right),\end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned}s_1 &\equiv 2(y p_y - x p_x) \\ s_2 &\equiv 2(x p_y + y p_x) \\ s_3 &\equiv 3(y^2 - x^2) + p_y^2 - p_x^2 \\ s_4 &\equiv 2(3xy + p_x p_y).\end{aligned}$$

Jacobiho matici zde vyjádříme ve složkách. Ve výše uvedeném označení dostaneme

$$\begin{aligned}J_{11} &= 2b x p_x - c O \left\{ 2p_x + \frac{1}{2O^2} \left[x s_1 + p_x \left(s_3 + x \frac{r}{2O^2} \right) \right] \right\} + d(x p_x + y p_y) \\ J_{12} &= 2b y p_x - c O \left\{ 2p_y - \frac{1}{2O^2} \left[y s_1 + p_x \left(s_4 + y \frac{r}{2O^2} \right) \right] \right\} + d(x p_y - y p_x) \\ J_{13} &= 2a + b\beta^2 - c O \left\{ 2x + \frac{1}{2O^2} \left[r + p_x \left(2s_1 + p_x \frac{r}{2O^2} \right) \right] \right\} + d \left(p^2 - \frac{\tau_-}{2} \right) \\ J_{14} &= c O \left\{ 2y - \frac{1}{2O^2} \left[p_y s_1 + p_x \left(s_2 + p_y \frac{r}{2O^2} \right) \right] \right\} + d(xy + p_x p_y) \\ J_{21} &= 2b x p_y + c O \left\{ 2p_y - \frac{1}{2O^2} \left[x s_2 + p_y \left(s_3 + x \frac{r}{2O^2} \right) \right] \right\} + d(y p_x - x p_y) \\ J_{22} &= 2b y p_y + c O \left\{ 2p_x - \frac{1}{2O^2} \left[y s_2 + p_y \left(s_4 + y \frac{r}{2O^2} \right) \right] \right\} + d(x p_x + y p_y) \\ J_{23} &= J_{14} \\ J_{24} &= 2a + b\beta^2 + c O \left\{ 2x - \frac{1}{2O^2} \left[r + p_y \left(2s_2 + p_y \frac{r}{2O^2} \right) \right] \right\} + d \left(p^2 - \frac{\tau_-}{2} \right) \\ J_{31} &= 2a + b(y^2 - 3x^2 - 2O^2) - c O \left\{ 6x + \frac{1}{2O^2} \left[r + x \left(2s_3 + x \frac{r}{2O^2} \right) \right] \right\} - d \left(\beta^2 - \frac{\tau_-}{2} \right) \\ J_{32} &= -4bxy - c O \left\{ 6y - \frac{1}{2O^2} \left[y s_3 + x \left(s_4 + y \frac{r}{2O^2} \right) \right] \right\} - d(xy + p_x p_y) \\ J_{33} &= -J_{11} \\ J_{34} &= -J_{21} \\ J_{41} &= J_{32} \\ J_{42} &= -2a - b(x^2 - 3y^2 - 2O^2) - c O \left\{ 6x - \frac{1}{2O^2} \left[r + y \left(2s_4 + y \frac{r}{2O^2} \right) \right] \right\} - d \left(\beta^2 + \frac{\tau_-}{2} \right).\end{aligned}$$

Příloha B

Program

V průběhu práce s geometrickým modelem byl vytvořen rozsáhlý program obsahující textový editor, grafické rozhraní a interpretovaný prováděcí jazyk s vlastní syntaxí a nabízející bohaté možnosti jak textového, tak grafického výstupu. Program v současné chvíli obsahuje více než 300 funkcí, které jsou zaměřeny na výpočet a zpracování zejména trajektorií, Poincarého řezů a regularity klasické verze geometrického modelu a spekter verze kvantové, a je stále a dále vyvíjen. Obsahuje dostatečně univerzální rozhraní, díky němuž je připraven pro rozšíření o další dynamické systémy. Částečně je implementován Hénon-Heilesův systém, klasická verze systému interagujících bosonů v poslední době byl rovněž přidán „cusp“ systém.

Popis programu v tomto dodatku si neklade za cíl seznámit uživatele podrobně se všemi funkcemi, které program nabízí. Snaží se spíše podat ucelený souhrn informací, které umožní začít s programem pracovat a zvládnout orientaci ve složitějších výrazech a speciálních funkcích.

B.1 Zdrojový kód programu

Vlastní program je napsán v jazyce C# a jeho zdrojové kódy lze nalézt na příloženém CD. Program se skládá z těchto projektů:

- **Core** stojí v hierarchii nejnižší a obsahuje základní třídy a rozhraní, které používají všechny ostatní projekty.
- **DLLWrapper** je obálkou pro dll knihovnu s funkcemi knihovny LAPACK a ARPACK.
- **Math** je složen ze tříd, které jednak zapouzdřují odvozené číselné typy (např. komplexní čísla, vektory, matice, dlouhá čísla, zlomky), základní algebraické operace a další funkce s nimi, a dále obsahuje rozhraní a třídy pro výpočet klasických dynamických systémů a metody SALI.
- **Expressions** definuje veškeré funkce, operace syntaxi a obsahuje interpet příkazů.
- **Forms** je uživatelské rozhraní programu pro operační systém Windows.

- **GCM**, **IBM**, **PT**, **ManyBody** obsahuje třídy pro jednotlivé modely (geometrický kolektivní model, model interagujících bosonů, modely s jedním stupněm volnosti pro studium fázových přechodů včetně modelu CUSP a modely pro pohyb dvou a gravitačně se přitahujících dvou a tří těles) a modely z nich odvozených. Tyto třídy obsahují například pohybové rovnice, vztahy mezi parametry modelů, výpočet Hamiltonovy matice k diagonalizaci, výpočet hodnot pro Peresovy mříže atd.
- **Test** je testovací konzolový projekt.

V příložené verzi programu je knihovna `lapack.dll` pouze ve 32-bitové verzi¹. Pokud je během výpočtů vyžadována funkce z této knihovny (jedná se pouze o funkci určenou k diagonalizaci velkých matic), program musí být spuštěn ve 32-bitovém režimu. Pokud však tuto knihovnu nepotřebujeme, je program samozřejmě schopen pracovat v 64-bitovém režimu se všemi výhodami, které to přináší (zejména možnost pracovat s bloky paměti většími než 2GB).

B.2 Základy práce s programem

Zkompilovaný program je možné najít na přiloženém kompaktním disku, a to jednak jako instalační balíček, jednak je v samostatné složce program samotný připravený ke spuštění (program není nutné instalovat). Jelikož ke svému běhu vyžaduje nainstalovaný .NET framework 2.0, je přiložena i instalace tohoto produktu. Na systémech s operačním systémem Windows však bývá .NET framework zpravidla již nainstalován.

Instalační balíček programu lze též stáhnout z webové adresy

<http://www-ucjf.troja.mff.cuni.cz/~stransky/program>

Spuštění programu se provede souborem `CollectiveModels.exe`. Poté se objeví prázdné okno programu nebo se načtou projekty, které byly zavřeny spolu s posledním ukončením programu. Nový projekt se založí pomocí hlavní nabídky příkazem `File->New` a zprvu obsahuje pouze prázdné editační okno.

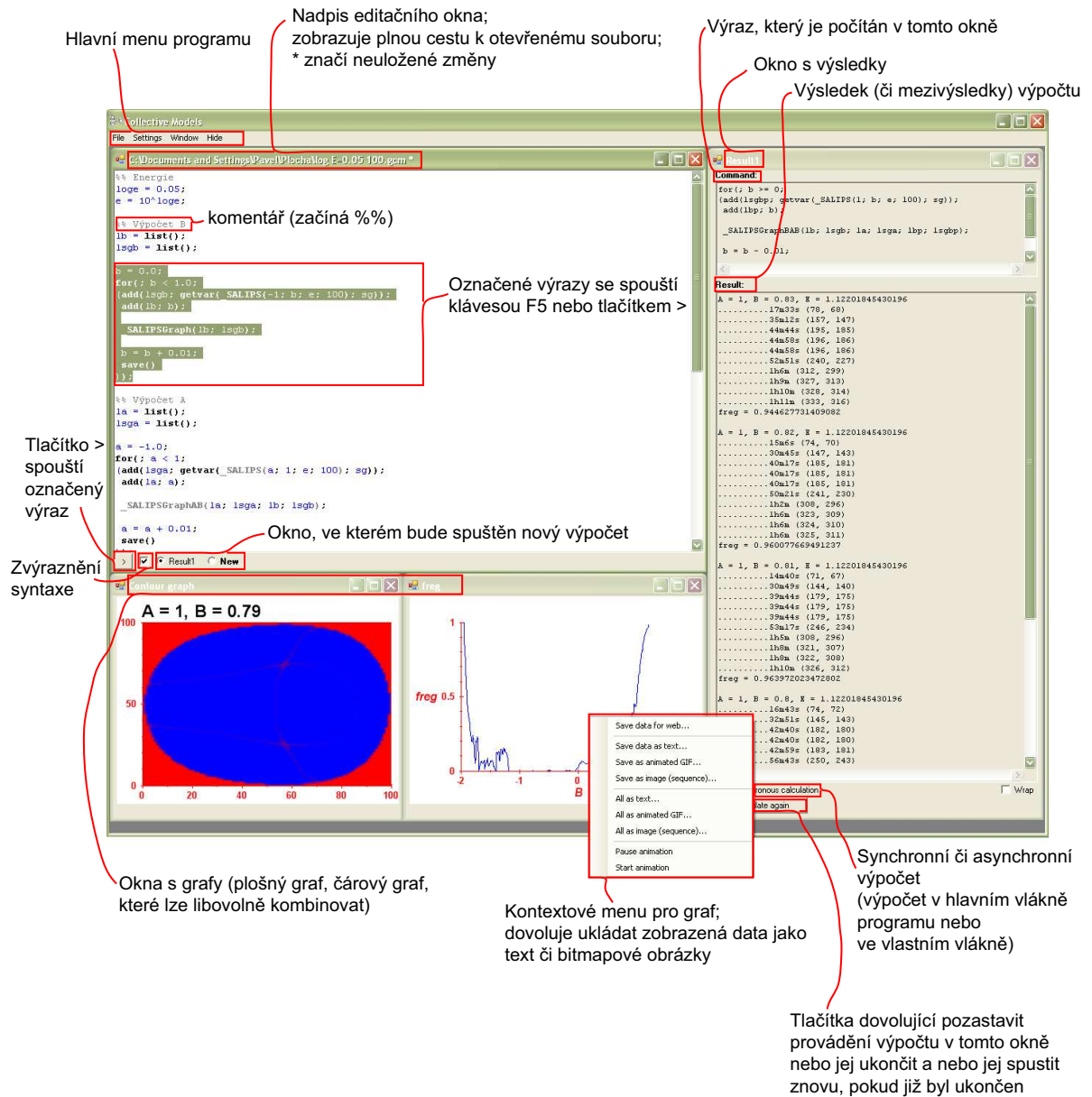
Obrazovka při otevření rozsáhlejšího projektu může vypadat podobně, jako je znázorněno na obrázku B.1. Na něm jsou popsány všechny ovládací a informační prvky.

Do editačního okna lze zadávat příkazy, přičemž záleží na velikosti písmen (s výjimkou uživatelských funkcí, které budou popsány v části B.5. Příkazy (stejně jako argumenty funkcí) se navzájem oddělují středníkem. Za posledním příkazem však středník být nemusí. Příkazy lze sdružovat do bloků pomocí obyčejných kulatých závorek, uvnitř kterých se opět oddělují středníky. Za posledním příkazem v bloku však středník být nesmí. Pokud je blok například v argumentu funkce, která vyžaduje hodnotu, pak program za tuto hodnotu bere výsledek posledního výrazu v bloku.

Pokud se v editačním okně po tři vteřiny nestiskne žádná klávesa, program automaticky zvýrazní syntaxi, a to tímto způsobem:

- **modře** proměnná, operátory a závorky bloků či závorky výrazů

¹Byla zkompileována ze zdrojových kódů napsaných v jazyce FORTRAN pomocí kompilátoru g77.



Obrázek B.1: Popis oken programu.

- černě tučně funkce se svými závorkami
- šedivě komentář
- tmavě zeleně textový řetězec
- šedivě tučně vlastní funkce
- červeně tučně chyby

Program neobsahuje žádná speciální klíčová slova, vše je implementováno pomocí funkcí (včetně například cyklů, podmínek a dokonce i operátorů²).

Příkazy se spouští klávesou F5 nebo tlačítkem > umístěným vlevo dole v editačním okně, přičemž se vždy spustí pouze ta část, která je v editačním okně označena. Ve spodní části editačního okna lze navíc zvolit, v jakém výpočetním okně bude výpočet proveden. Každé výpočetní okno se implicitně spouští v novém výpočetním vlákne, což znamená, že v jednu dobu může běžet (teoreticky) libovolné množství výpočtů. Operační systém automaticky přiděluje vlákna volným výpočetním jednotkám (například jádrům vícejádrového procesoru), což umožňuje jednoduchou paralelizaci. Program však neumožňuje komunikaci mezi jednotlivými vlákny jinak než pomocí proměnných, které jsou všem vláknům sdílené.

Ve výpočetním okně se ve spodní textovém poli zobrazují průběžné informace o probíhající výpočtu a po dokončení výpočtu výsledek posledního zpracovaného výrazu. Toho lze využít k výpisu hodnoty proměnné—stačí proměnnou v editačním okně označit a stisknout F5 nebo tlačítko >. Výpočet lze také pozastavit či zcela přerušit. To však nevrátí změny, které byly na proměnných před přerušením provedeny.

Paměť s proměnnými je v rámci jednoho projektu sdílená. Hodnoty proměnných a jejich názvy se ukládají do nestrukturovaného seznamu, který nazýváme *kontext*³. Obsah hlavního kontextu se zobrazí po zadání příkazu

```
getcontext();
```

a proměnné lze z kontextu vymazat příkazem

```
clear(proměnná1[; proměnná2[; ...]);
```

Program umožňuje bohatý grafický výstup včetně tvorby animací. Graf se zobrazuje příkazem

```
show(
  proměnná s grafem nebo grafy;
  [jméno okna] = "Graph";
  [počet grafů v řádku, pokud zobrazujeme více grafů najednou] = 1;
  [umístění okna];
  [velikost okna]
);
```

²Operátory jsou uvnitř programu reprezentovány také jako funkce. Zápis $2+7+a+9$ je interpretován jako $+(2;7;a;9)$. Program rozumí i tomuto zápisu, je-li zadán přímo do editačního okna. Podobně složitější zápis $(1+a)*(2+b)*c$ program před zpracováním převede na tvar $*(+(1;a);+(2;b);c)$. Interpretace umožňuje použít efektivnější algoritmy, například součet pěti vektorů se provede pouze v jednom cyklu. Lze díky ní také snadno definovat vyšší než binární operátory.

³context

a po jeho provedení se otevře nové okno s názvem, který jsme zadali ve druhém parametru, a do něj se graf vykreslí. Pokud okno s daným názvem již existuje, jeho obsah bude nahrazen novým. Grafické možnosti tato nápověda nepopisuje, ale spoustu příkladů je možné najít na přiloženém CD v ukázkových souborech.

V rámci jednoho projektu lze vytvořit libovolné množství oken s výpočty / výsledky a libovolné množství oken s grafy, takže může vypadat například tak, jak je zobrazeno na obrázku B.1. Editační okno je vždy jen jedno. Program rovněž umožňuje současné otevření více projektů.

Při uložení projektu se zapisuje do datového souboru rozmístění jednotlivých oken na obrazovce, jejich obsah a obsah hlavního kontextu (tj. obsah všech proměnných). Po jeho opětovném otevření je tedy vše v takovém stavu, v jakém bylo při posledním uložení. Program však neumí uložit rozpracovaný (probíhající) výpočet.

Hlavní menu programu obsahuje kromě standardních funkcí pro práci se soubory projektů a s okny také příkaz `Hide`. Jeho stisknutí minimalizuje program do System tray (malé ikony, zobrazené převážně v pravé části hlavního panelu vedle hodin) a nastaví jeho prioritu na nízkou (idle). Probíhající výpočet tedy běží na pozadí a nezpomaluje další programy, se kterými je v tu chvíli pracováno.

B.3 Globální proměnné

Globální proměnné slouží k uložení některých parametrů konfigurace programu, nebo obsahují číselné konstanty. Používají se jako obyčejné proměnné, od kterých se liší tím, že začínají poměrkou.

Úplný seznam globálních proměnných je zde:

- `_dir` Aktuální adresář, který bude například nabízen jako první při otevírání či ukládání projektu či při exportu grafů.
- `_fnkdir` Adresář, ve kterém jsou uloženy uživatelské funkce (o uživatelských funkcích více v sekci B.5).
- `_gkdir` Adresář, do kterého se ukládá soubor `global.ctx` s globálním kontextem (globální kontext je popsán v následující sekci B.4).
- `_workingdir` Pracovní adresář pro dočasné soubory.
- `_pi` Ludolfovo číslo π .

Program neumožňuje definovat vlastní globální proměnné. K uložení proměnných mimo projekt tak, aby mohli být z jakéhokoliv jiného projektu čitelné, slouží globální kontext.

B.4 Globální kontext

Jak předávat data mezi jednotlivými projekty? K tomuto účelu program obsahuje *globální kontext*. Jedná se o kontext, který je uložen mimo všechny soubory projektu ve zvláštním souboru na disku. Proměnné do něj uložené jsou viditelné ze všech projektů a

lze jej tedy snadno využít například také ke sdílení hodnot konstant nebo k synchronizaci výpočtů. Díky tomu, že kontext může být uložen kdekoliv v síti, umožňuje dokonce synchronizaci výpočtů mezi více počítači.

Globální kontext je uložen v adresáři, na který ukazuje globální proměnná `_gkdir`⁴ v jednom souboru, který se vždy jmenuje `global.ctx`. Do projektu jej celý načteme funkcí

```
getglobalcontext();
```

zatímco jednotlivou proměnnou lze vyzvednout pomocí výrazem

```
getglobalvar(název globální proměnné);
```

Pokud je například v globálním kontextu uložena proměnná `a` a my chceme získat její hodnotu, lze postupovat dvěma způsoby. Buď vyzvedneme celý kontext a následně hodnotu

```
gctx = getglobalcontext();
a = getvar(gctx; a);
```

nebo použijeme přímý postup

```
a = getglobalvar(a);
```

První postup je výhodnější v případě, že chceme číst více proměnných zároveň, například kromě proměnné `a` i proměnnou `b`. Pokud do kontextu totiž přistupuje více projektů zároveň, může se stát, že při čtení druhým způsobem, tj. přímo, bude hodnota proměnné `b` jiným projektem změněna *před* jejím přečtením naším projektem, avšak již *po* přečtení proměnné `a` projektem naším. Pokud hodnoty těchto proměnných patří k sobě, způsobí to nekonzistenci v datech. Druhý postup naopak využijeme v případě, pokud chceme z globálního kontextu přečíst jen jednu nezávislou proměnnou.

Na závěr této části ještě stručně zmíníme další funkce pro práci s kontextem.

- `setglobalcontext(proměnná s kontextem)`; nahradí globální kontext kontextem z uvedené proměnné.
- `setglobalvar(proměnná)`; uloží danou proměnnou do globálního kontextu.
- `addglobal(globální proměnná; hodnota)`; přidá na konec proměnné typu seznam (List), nacházející se v globálním kontextu, uvedenou hodnotu (o seznamech a vůbec datových typech je více napsáno níže v sekci B.6).
- `clearglobal(globální proměnná)`; odstraní uvedenou proměnnou z globálního kontextu.

⁴Zde je nutno upozornit na odlišnost mezi pojmy globální kontext (a proměnná uložená v globálním kontextu) na jedné straně a globální proměnná na straně druhé. Zatímco globální proměnná je uložena v unikátním registru operačního systému a je tedy společná všem instancím programu spuštěného na daném počítači, globální kontext se svými počítači může uložen být kdekoliv a ukazuje na něj právě globální proměnná `_gkdir`. Pokud hodnotu této proměnné změníme, program začne používat zcela jiný globální kontext. Z toho vyplývá, že globálních kontextů může být libovolně mnoho. Jsou však všechny nezávislé, co je uloženo do jednoho se neprojeví v druhém, a program umí využívat v danou chvíli vždy pouze jeden.

B.5 Uživatelské funkce

Jednoduchý, a přitom účinný nástroj, jak strukturovat složitější výpočty a jak v mnoha projektech opakovat stejnou část kódu, nabízejí uživatelské funkce. Jedná se o prosté textové soubory (s příponou `*.txt`), které mohou obsahovat stejné výrazy jako editační okno projektu (to znamená i např. další uživatelské funkce; program se nebrání ani rekurzivnímu volání). Uživatelské funkce jsou hledány v adresáři, na který ukazuje globální proměnná `_fnmdir`. Jejich volání je identické s voláním funkce obyčejných, odlišují se pouze tím, že jako první znak se musí objevit podtržítka `_`. Jakoukoliv uživatelskou funkci lze volat s libovolným počtem i typem parametrů, přičemž parametry lze uvnitř funkce používat pomocí speciálních proměnných, které začínají rovněž podtržítkem

`_p1, _p2, ...`

Funkce je vždy spouštěna nad svým vlastním kontextem a tento kontext je vrácen jako její výsledek. Díky tomuto přístupu může být v kontextu uloženo libovolné množství proměnných. Funkce tedy může vracet i velmi komplexní výsledek.

Uvedme zde stručný příklad. Mějme uživatelskou funkci, která je uložena v souboru `algebra.txt` a obsahuje tyto jednoduché příkazy:

```
a = _p1 + _p2;
b = _p1 - _p2;
```

Pokud poté v projektu spustíme výraz

```
result = _algebra(10; 5);
x = getvar(result; a);
x = getvar(result; b);
```

budou mít proměnná `x` hodnotu 15 a `x` hodnotu 5.

B.6 Nápořěda

Program obsahuje integrovanou nápořědu ke všem funkcím. Seznam funkcí a operátorů program vypíše při zadání příkazu

```
fnames();
```

či seříděné podle abecedy po zadání

```
sort(fnames());
```

Pokud navíc jako první parametr funkce `fnames` uvedeme textový řetězec, pak program vypíše jen ty funkce, které daným řetězcem začínají.

Nápořědu k jednotlivým funkcím lze aktivovat třemi způsoby:

1. Výrazy

```
help(funkce);
use(funkce);
fullhelp(funkce);
```

zobrazí nápovědu, význam parametrů a oboje dohromady.

2. Operátory otazníku a dvojitého otazníku

```
?funkce;
??funkce;
```

jsou ekvivalentní výrazům `help(funkce)`, resp. `fullhelp(funkce)`.

3. Nápověda a význam parametrů se také zobrazí, pokud nad napsanou funkcí v editačním okně podržíme kurzor myši.

Speciálním případem je funkce pro vytvoření grafu (graph). Ta obsahuje spoustu parametrů, které určují vzhled grafu, jeho umístění, možnosti animace atd. Parametry se předávají speciálním kontextem nebo pohodlněji pomocí textového řetězce. Seznam parametrů se vypíše příkazem

```
gparams();
```

a nápověda k nim pomocí

```
gparamhelp(parametr);
```

Nejlepším postupem, jak se s programem seznámit, je zkusit si v něm něco vypočítat. Za tímto účelem je na přiloženém CD několik souborů s výsledky výpočtů týkajících se geometrického modelu. Kromě ukázek funkcí programu mohou tyto soubory sloužit i k přímému použití například pro zopakování výpočtu s jinými parametry. Dále je přiložen soubor `example.gcm`, který stručně seznamuje se syntaxí, s prací s proměnnými a se složenými typy (seznamy, řadami, vektory, maticemi a jejich indexací). Tento soubor je pro snazší orientaci přetištěn v obrázku B.2.


```

%% Selected command is executed by pressing F5 key
%% -----

%%
%%
%% Help
%%
fnames();           %% names of all functions
sort(fnames());    %% names of all functions (sorted)
fnames("lhoqgcm"); %% all functions beginning with lhoqgcm

??fnames;          %% Help for the function and its parameters
fullhelp(fnames);

gparams();         %% Name of parameters for the graph

%%
%% Various types of a variable
%%
x = -1;            %% integer
y = 0.62;          %% double
s = "Hallo";      %% string

l = long("435980439043950934550983409534859034285");
%% long number (it can have really arbitrary length)
lf = fraction(5; long("35646")); %% fraction

%% Vector types
v = vector(-1; 3; 2; 1; 0; 1.2); %% vector with 6 components
%% (vector components is always converted to double)
p = point(-2; 1); %% point (its components is also always converted to double)
pv1 = pointvector(vector(-1; 0; 1.5); vector(0; 2.5; -1));
pv2 = pointvector(point(-1; 0); point(0; 2.5); point(1.5; -1));
%% vector of points (variables pv1 and pv2 are the same)

%% Array - can have arbitrary number of dimensions; all items must have the same type
a = array(pv1; pv2); %% array with two elements
2:7; %% 1D array of successive integers from 2 to 7
4:15:3; %% 1D array of integers from 4 to 15 with step 3

%% List - onedimensional object, elements need not have the same type
lst = list(v; p);
add(lst; pv1); %% add the content of the variable pv1 to the end of the list lst
addbefore(lst; l); %% add the content of the variable l to the beginning of the list lst

%% Universal creating function
an = new("array"; 2; 3; 2; "vector"; 6);
%% 3D array with dimensions (2;3;2) of vectors of length 6
new("int"); %% integer
new("array"; 5; "array"; 3; 4; "int");
%% 1D array of 5 2D arrays with dimensions (3;4) if integers
m = new("matrix"; 10; 10); %% matrix (2D object)

```

Obrázek B.2: Vypis souboru example.gcm.

```

%%
%%
%% Retyping
double(-1);          %% int to double
vector(2:7);        %% array to vector
toarray(list(3; 7; 11));  %% list to array

%%
%%
%% Indexing and assignment
v[2];               %% element of a vector
getx(pv1);          %% x values of a pointvector(or of a point);
v[2:$];             %% elements from the one with index 2 to the last
v[array(3;5;3)];    %% element no 3, 5, 3 (in the specified order)

an[1;2;0] = v;      %% assignment to the element [1;2;0] of the array an
an[0;;1] = v;      %% assigns v to all elements with the first index 0 and the third index
an;                %% simply prints the content of the array

%%
%%
%% Working with arrays
mean(v);            %% mean value of the elements of the vector
#mean(an);          %% mean value of each element of the array an (forced by the sign #)

%%
%%
%% Basic algebra
x + (100 * x - 1.1 * y);  %% basic operations

vx = 100 * v - 11;      %% multiplying and subtracting from the vector (from each of its elem
v * vx;                 %% scalar product
v ** vx;                 %% multiply corresponding vector elements
s ~ " world " ~ x;      %% string joining

%%
%%
%% Logical operations
pv1 == pv2;           %% is equal
pv1 != pv2;           %% is different
(x == -1) || (y == 3);  %% logical operators

%%
%%
%% Cycles and conditions
if(x == -1; (x = x + 1; y = y - 1); x = x + 2);

for(i = 0; (i < 100) && (x != -1);
  add(lst; i);
  i = i + 1
);

```

Obrázek B.3: Pokračování obrázku B.2.

Příloha I

Regular and chaotic vibrations of deformed nuclei with increasing γ -rigidity

Přetisk článku [Cej04] publikovaného v časopise *Physical Review Letters* **93**, 102502 (2004).

Regular and Chaotic Vibrations of Deformed Nuclei with Increasing γ -Rigidity

Pavel Cejnar and Pavel Stránský

Institute of Particle and Nuclear Physics, Charles University, V Holešovičkách 2, 180 00 Prague, Czech Rep.

We study classical trajectories corresponding to $L = 0$ vibrations in the geometric collective model of nuclei with stable axially symmetric quadrupole deformations. It is shown that with increasing stability against the onset of triaxiality the dynamics passes between a fully regular and semiregular limiting regimes. In the transitional region, an interplay of chaotic and regular motions results in complex oscillatory dependence of the regular phase space on the Hamiltonian parameter and energy.

PACS numbers: 21.60.Ev, 05.45.Pq

Although models of collective dynamics of atomic nuclei [1, 2] belong to the oldest subject of nuclear physics, they still exhibit enormous potential for yielding important new results. Many of them is connected with a modern form of the collective model, the interacting boson model (IBM) [3], but purely geometric approach still provides adequate framework for the interpretation of main features of nuclear collective motions, even those accommodated within the IBM. In particular, the description of shape phase transitions [4] and the corresponding critical-point symmetries [5] resort basically from the old formulation of the geometric model.

In this Letter, we use the geometric model to study regular and chaotic classical motions [6] of a quadrupole vibrator with increasing stability of an axially symmetric deformation. Our approach is related to studies of single-particle orbits in mean-field potentials associated with different nuclear shapes [7], but addresses—in contrast—*collective* dynamics of the nucleus as a whole. This was investigated in the IBM classical limit by Alhassid, Whelan, Paar *et al.* [8, 9], demonstrating the existence of regular domains in the IBM parameter space and the correspondence between classical and quantal measures of chaos. Our work supplements these older results by (i) using purely geometric model of collective motions and (ii) by focusing in detail on a different transitional region of collective parameters. Although the transition studied here is not connected with any kind of critical behavior and seemingly represents just a smooth departure from an integrable regime, the results show—quite surprisingly—great fine-structured variability and complexity of collective vibrations, involving the crossover between different types of regular orbits and coexistence of various regular and chaotic regions in the phase space.

The Hamiltonian of the geometric collective model (GCM) [10] in the truncated form reads as

$$H = \frac{\sqrt{5}}{2K} [\pi \times \pi]^{(0)} + \sqrt{5}A[\alpha \times \alpha]^{(0)} - \sqrt{\frac{35}{2}}B[[\alpha \times \alpha]^{(2)} \times \alpha]^{(0)} + 5C \left([\alpha \times \alpha]^{(0)} \right)^2, \quad (1)$$

where $\alpha_\mu^{(2)}$ form the spherical tensor of quadrupole shape variables (they can be viewed as coefficients at the $Y_{2\mu}$ spherical harmonics in an expansion of nuclear radius),

$\pi_\mu^{(2)} = -K(d\alpha_\mu^{(2)*}/dt)$ the associated tensor of momenta, and $[\bullet \times \bullet]^{(\lambda)}$ stands for the coupling to angular momentum λ . The constants $\{K, A, B, C\}$ are adjustable parameters. We neglect higher-order terms of the Hamiltonian, in particular the 3rd-order kinetic term. The simplified form (1) was shown [11] to properly reproduce basic features of structural shape transitions in nuclei and can be linked to the Casten triangle of the IBM (although classical-limit IBM Hamiltonians contain also the higher-order terms).

Required Hermiticity of the Cartesian matrix α_{ij} of shape variables leads to conditions $\alpha_0^{(2)} \equiv \alpha_0$, $\alpha_{\pm 1}^{(2)} \equiv \pm(\alpha_1 \pm i\alpha'_1)$, and $\alpha_{\pm 2}^{(2)} \equiv \alpha_2 \pm i\alpha'_2$, where α_0 , α_1 , α'_1 , α_2 and α'_2 represent five real coordinates of the model. The transformation into the principal frame of deformation yields $\alpha_1 = \alpha'_1 = \alpha'_2 = 0$ and the two remaining coordinates can be parametrized in the usual way [1]: $\alpha_0 \equiv x = \beta \cos \gamma$ and $\sqrt{2}\alpha_2 \equiv y = \beta \sin \gamma$. Here, $\beta \geq 0$ measures the degree of deformation while γ determines the shape type and triaxiality (except γ equal to even or odd multiples of $\pi/3$, attributed to prolate or oblate axisymmetric ellipsoids, respectively, the shape is triaxial, with maximal asymmetry at odd multiples of $\pi/6$).

To investigate classical dynamics with Eq. (1), one has to calculate trajectories in the five-dimensional configuration space. At each point of a trajectory, the tensor α_{ij} can be diagonalized to get two shape coordinates x and y (or β and γ) and three Euler angles $\{\theta_1, \theta_2, \theta_3\}$ characterizing the relative orientation of the principal and laboratory frames. Since Hamiltonian (1) is a rotation scalar, it conserves the angular momentum, which is defined [2] as $L = -i\sqrt{10}[\alpha \times \pi^*]^{(1)}$. Having less than five independent motional integrals in convolution, the system is generally nonintegrable (except special cases discussed below).

A considerable simplification follows from the choice $L = 0$. The resulting conditions $d\alpha_1/dt = d\alpha'_1/dt = d\alpha'_2/dt = 0$ imply that the principal frame is at rest and the motion can be described solely in terms of x and y . The $L = 0$ Hamiltonian reduces to

$$H_0 = \frac{1}{2K}(\pi_x^2 + \pi_y^2) + A(x^2 + y^2) + B(x^3 - 3y^2x) + C(x^2 + y^2)^2, \quad (2)$$

where we recognize the well-known expression for the

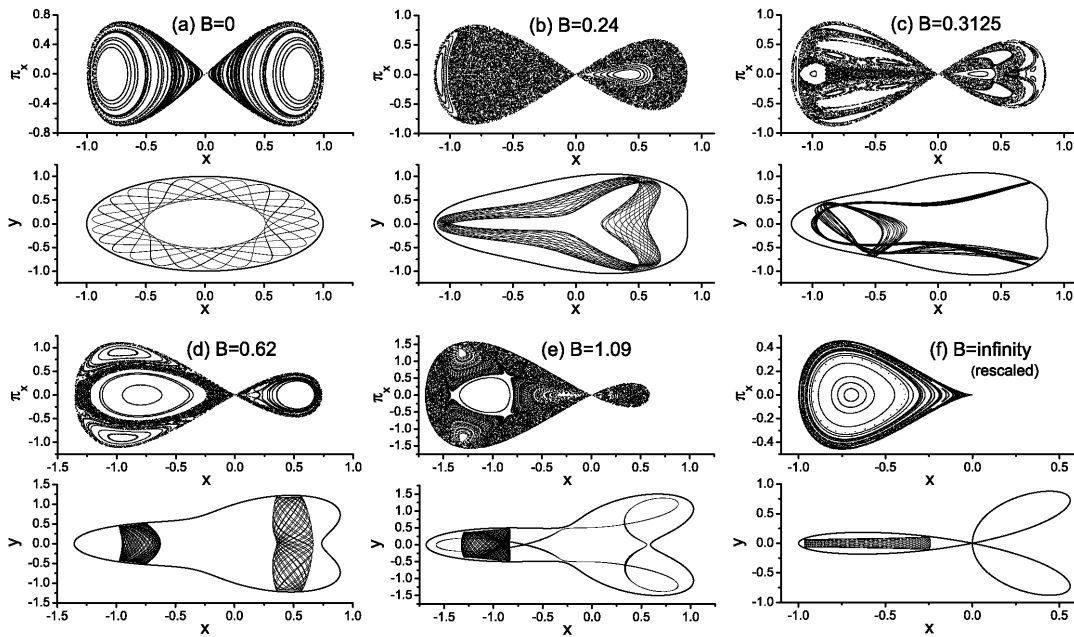


FIG. 1: Classical trajectories (second and fourth rows) and Poincaré phase-space sections (first and third rows) corresponding to Hamiltonian (2) with $K = -A = C = 1$ and $E = 0$. The value of B increases as indicated in panels (a)–(f). Only few examples of regular trajectories were selected (the outer curve marks the border of energetically accessible area) while each Poincaré section involves a total number of 20000 crossings of 52 randomly chosen trajectories.

GCM potential energy:

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

For $A < A_c = B^2/4C$, the global minimum of the potential at $\beta = \beta_0 > 0$ describes a deformed equilibrium shape (prolate, for $B < 0$, or oblate, for $B > 0$), while for $A > A_c$ the minimum $\beta_0 = 0$ leads to the spherical shape (both minima coexist in the interval $0 \leq A \leq 9B^2/32C$). The change of B from negative to positive values rotates the γ coordinates of three degenerate minima from $(0, 2\pi/3, 4\pi/3)$ to $(\pi/3, \pi, 5\pi/3)$; except this prolate-oblate transformation the potentials with $+B$ and $-B$ are equivalent. While the $B = 0$ case is γ -independent, with the equilibrium shape unstable against the onset of triaxiality, the increase of $|B|$ stabilizes the axial symmetry.

For $K = A = 1/2$, $B = -1/3$ and $C = 0$, Eq. (2) represents the Hamiltonian introduced by Hénon and Heiles [12], one of the most studied examples of classical chaos. In our case, in contrast, $C > 0$ expresses a rapid increase of nuclear potential energy with deformation, and the choice of $A < 0$ indicates that we will be dealing with vibrations around a deformed equilibrium shape. The possibility to independently rescale energy, coordinates, and time in Eq. (1) reduces (in the classical case) the number of essential free parameters to just one. We choose here B to play this role which implies that we have to separately distinguish the $A < 0$ and $A > 0$ cases. To study effects of increasing γ -rigidity on deformed nuclei we fix $A = -1$, while the other parameters are—without

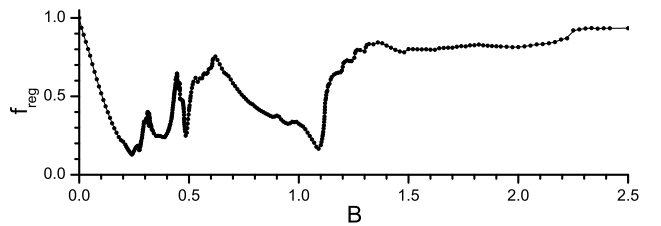


FIG. 2: The regular fraction of the Poincaré phase-space section as a function of B for $E = 0$.

a loss of generality—set to $K = C = 1$. (We use the same arbitrary units for parameters A , B , and C and for the energy.) Examples of trajectories and Poincaré $y = 0$ phase-space sections at energy $E = 0$ for various values of B from 0 to ∞ are shown in Fig. 1.

Hamiltonian (2) with $B = 0$ is symmetric under rotations in the xy -plane and, therefore, integrable with a trivial second motional integral $I = x\pi_y - y\pi_x$. It is related to the $O(6)$ - $U(5)$ transition of the IBM. The associated motions are oscillations in the radial direction with free “spinning” in the transverse direction, see Fig. 1(a). Two elliptic fixed points at $x = \pm\sqrt{-A/2C}$, $\pi_x = 0$ and a hyperbolic one at $x = \pi_x = 0$ are present in the Poincaré section. They correspond to the minimum circle and the central local maximum of the potential. Concentric curves in the Poincaré section result from β vibrations combined with circulations in the γ direction, the enveloping curve being pure β vibration via the local

maximum. Two caustics form inner and outer boundaries of the trajectory.

As no explicit second integral of motions is known for $B \neq 0$, we expect increasing chaos when the γ -soft limit is being departed. This is, however, not quite so. Although the regularity observed away from this limit must be imperfect, we will see that it involves virtually integrable regions. Clearly, the degree of chaos should depend on energy. For E close to the minimal value $E_{\min} = V(\beta_0, k\pi/3)$ with k odd, the system performs nearly harmonic vibrations around one of the minima. For $E \gg 0$, one again expects regular behavior as the quartic term in potential (3) completely prevails. The most interesting region is thus around $E \sim 0$.

First, we realize in Fig. 1(f) that the limit of $|B| \rightarrow \infty$ corresponds to highly regular dynamics. In this case, the Hamiltonian can be rescaled using $\tilde{\beta} = \beta/B$, $\tilde{t} = Bt$, and $\tilde{H}_0 = H_0/B^4$, so that the transformed potential

$$\tilde{V}_\infty(\tilde{\beta}, \gamma) \equiv \lim_{B \rightarrow \infty} \frac{V(\beta, \gamma)}{B^4} = \tilde{\beta}^3 \cos 3\gamma + \tilde{\beta}^4 \quad (4)$$

(the kinetic term remains unchanged) restores standard potential (3) at the beginning of the deformed-spherical phase-coexistence region. We note that although Fig. 1(f), that corresponds to $E = 0$, contains no observable chaotic feature, the regularity does not survive an increase of energy above zero. The approximate validity of the X(5) critical-point symmetry in the phase-coexistence region is probably not the reason for the asymptotic regular dynamics observed here since potential (4) is already far away from the X(5) assumptions [3]. We therefore detect a somewhat surprising behavior. Regular trajectories fill nearly rectangular regions, as the one shown in Fig. 1(f), again indicating some interesting caustic properties. The related Poincaré section exhibits stable periodic and nonperiodic $\beta \times \gamma$ vibrations with an elliptic fixed point located on the left from the potential minimum; the outermost curve represents the pure β vibration visiting the $\beta = 0$ saddle point ($x = \pi_x = 0$ for $E = 0$ is a hyperbolic fixed point).

Regular dynamics, however, is not a privilege of only the $B = 0$ and $|B| \rightarrow \infty$ limits. It can be observed—at some degree and for certain energies—also at intermediate B values. For instance, Fig. 1(d) shows periodic and nonperiodic orbits coexisting with some chaotic motions at $B = 0.62$. In contrast, panels (b), (c), and (e) of Fig. 1 demonstrate varying degrees of chaos encountered in the regions around (d). Some regular islands persist in the Poincaré sections, but their structure and location change with B , as well as the shape and area of surrounding chaotic domains. A number of fixed points can be found, but the finite precision of calculations does not allow us to disclose the finest details of the phase-space structure at arbitrarily small scales. Trajectories responsible for the regular islands (only few examples are shown in Fig. 1) represent some sophisticated and unexpectedly stable vibrations in both β and γ directions.

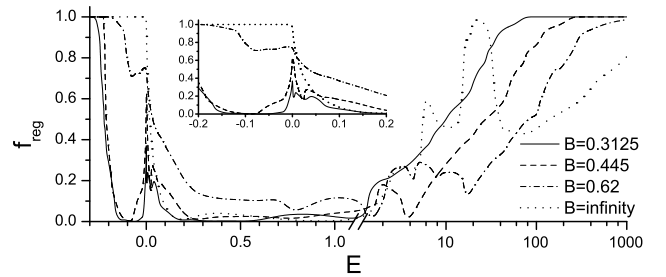


FIG. 3: The regular fraction of the Poincaré section as a function of energy for values of B corresponding to maxima of the curve in Fig. 2. The horizontal axis is split into linear and logarithmic parts. The inset expands the $E \sim 0$ region.

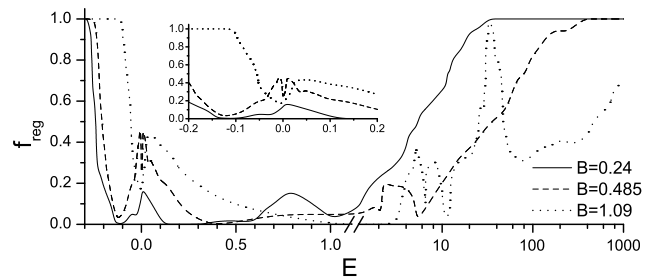


FIG. 4: The same as in Fig. 3, but at three minima of Fig. 2.

To quantitatively measure the degree of chaos present in our model at different values of B , we calculate the fraction $f_{\text{reg}} = S_{\text{reg}}/S_{\text{tot}}$ of the area with regular trajectories in the $y = 0$ Poincaré surface of section to the whole accessible area in the $x \times \pi_x$ plane. This is for $E = 0$ shown in Fig. 2. We see three well separated maxima ($B = 0.313, 0.445$, and 0.620) and four minima ($B = 0.240, 0.380, 0.445$, and 1.090) in the medium- B region (the values of B in Fig. 1 were taken to coincide with some of these extremes). This fine structure extends also in energy, as demonstrated in Figs. 3 and 4. Here we show the dependence of the regular fraction f_{reg} on energy for some fixed values of B that correspond, respectively, to the local maxima and minima from Fig. 2.

The dependences shown in Figs. 3 and 4 confirm the anticipated regular behaviors at very low and very high energies. We observe that for lower values of B the decay of low- E regularity starts already at energies for which trajectories are still deep inside the potential well around β_0 . With increasing B , however, the whole $E < 0$ region becomes more and more regular and for $B = \infty$ chaos starts developing only above $E = 0$, when the region around $\beta = 0$ becomes available. The high- E growth of f_{reg} is roughly logarithmic for large E and begins at energies that increase with B . For large values of B ($=1.09$ and ∞ in our sample) we observe a local peak (between $E = 10$ and 100) of almost completely regular dynamics.

Perhaps the most interesting features of Figs. 3 and 4 is the increase of regularity at and around zero energy (as

enhanced in the insets). While the medium- B maxima in Fig. 2 correspond to $E = 0$ peaks in Fig. 3, local minima from Fig. 2 are associated with peaks around $E \sim 0$ in Fig. 4 (the increase of f_{reg} for the former is, nevertheless, higher, up to 0.8, than for the latter). We anticipate that this behavior is connected with the regular region detected inside the IBM Casten triangle [8], which—as can be shown (cf. Fig. 9 of Ref.[13])—is correlated with a bunching of quantum levels near $E \sim 0$. This issue will be addressed in future work.

We realize that although Hamiltonian (2) has the standard form corresponding to a perturbed integrable system (the perturbation weighted by B), the usual scenario describing the onset of chaos in such systems [6] is not followed here. Instead of a monotonous growth of chaotic measures with increasing perturbation strength, we observe rather sophisticated competition of regular and chaotic types of motions—in contrast with Ref.[14], for instance, where a system similar to ours was shown to exhibit a smooth increase of chaos. This indicates that

the GCM with $L = 0$ represents one of the most interesting examples of classical chaos in two dimensions.

In conclusion, we studied classical $L = 0$ vibrations around a deformed equilibrium shape in the geometric collective model, that captures the most essential collective degrees of freedom in nuclei. Complex interplay of regular and chaotic dynamics disclosed already in the simplest approach shows that nuclear collective motions hide rather nontrivial features. We highlight the following findings: (i) fully regular dynamics in the $B \rightarrow \infty$ limit for $E \leq 0$, (ii) the increase of regularity for $E \sim 0$ in the medium- B region, (iii) the oscillatory dependence of the regular Poincaré area on both B and E connected with the emergence and decay of various types of stable regular orbits. Similar analyses should be performed also for $L > 0$ and $A > 0$.

The authors acknowledge fruitful discussions with Z. Pluhař and a financial support of GAČR under Grant No. 202/02/0939.

-
- [1] A. Bohr and B. Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol. II (Benjamin, Reading, Mass, 1975).
- [2] J.M. Eisenberg and W. Greiner, *Nuclear Theory*, Vol. 1, *Nuclear Models* (North-Holland, Amsterdam, 1987).
- [3] F. Iachello and A. Arima, *The Interacting Boson Model* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1987).
- [4] A.E.L. Dieperink, O. Scholten, and F. Iachello, Phys. Rev. Lett. **44** (1980) 1747; D.H. Feng, R. Gilmore, and S.R. Deans, Phys. Rev. C **23**, 1254 (1981); S. Levit and Y. Alhassid, Nucl. Phys. **A413**, 439 (1984); E. López-Moreno and O. Castaños, Phys. Rev. C **54**, 2374 (1996); R.F. Casten, D. Kusnezov, and N.V. Zamfir, Phys. Rev. Lett. **82**, 5000 (1999); J. Jolie, P. Cejnar, R.F. Casten, S. Heinze, A. Linnemann, and V. Werner, Phys. Rev. Lett. **89**, 182502 (2002).
- [5] F. Iachello, Phys. Rev. Lett. **85**, 3580 (2000); **87**, 052502 (2001).
- [6] M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1990).
- [7] R. Arvieu, F. Brut, J. Carbonell, and J. Touchard, Phys. Rev. A **35**, 2389 (1987); B. Milek and J. Reif, Z. Phys. A **339**, 231 (1991); P. Rozmej and R. Arvieu, Nucl. Phys. **A545**, C497 (1992); W.D. Heiss, R.G. Nazmitdinov, and S. Radu, Phys. Rev. Lett. **72**, 2351 (1994); Phys. Rev. C **52**, 3032 (1995); W.D. Heiss and R.G. Nazmitdinov, Phys. Rev. Lett. **73**, 1235 (1994).
- [8] Y. Alhassid, A. Novoselsky, and N. Whelan, Phys. Rev. Lett. **65**, 2971 (1990); Y. Alhassid and N. Whelan, Phys. Rev. C **43**, 2637 (1991); Phys. Rev. Lett. **67**, 816 (1991); N. Whelan and Y. Alhassid, Nucl. Phys. **A556**, 42 (1993); Y. Alhassid, in *Perspectives for the Interacting Boson Model*, edited by R.F. Casten *et al.* (World Scientific, Singapore, 1994), p. 591.
- [9] V. Paar, D. Vorkapić, and A.E.L. Dieperink, Phys. Rev. Lett. **69**, 2184 (1992).
- [10] G. Gneuss, U. Mosel, and W. Greiner, Phys. Lett. **30B**, 397 (1969); **31B**, 269 (1970); G. Gneuss and W. Greiner, Nucl. Phys. **A171**, 449 (1971).
- [11] Jing ye Zhang, R.F. Casten, and N.V. Zamfir, Phys. Lett. B **407**, 201 (1997); M.A. Caprio, Phys. Rev. C **68**, 054303 (2003).
- [12] M. Hénon and C. Heiles, Astron. J. **69**, 73 (1964).
- [13] P. Cejnar and J. Jolie, Phys. Rev. E **61**, 6237 (2000).
- [14] T.H. Seligman, J.J.M. Verbaarschot, and M.R. Zirnbauer, Phys. Rev. Lett. **53**, 215 (1984).

Příloha II

Classical chaos in the geometric collective model

Přetisk článku [Str06] publikovaného v časopise *Physical Review C* **74**, 014306 (2006).

Classical chaos in the geometric collective model

Pavel Stránský¹, Matúš Kurian², Pavel Cejnar¹

¹*Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, V Holešovičkách 2, 180 00 Prague, Czech Rep.*

²*Nuclear Physics Institute, Academy of Sciences of the Czech Republic, 250 68 Řež, Czech Rep.*

Collective vibrations and rotations of atomic nuclei are investigated from the classical viewpoint within the geometric collective model. It is shown that the model, even in its truncated form, exhibits very sophisticated interplay of regular and chaotic modes of motions. We quantify the proportion of regular and chaotic orbits in the phase space and analyze its sensitive dependence on the model control parameters, energy, and angular momentum. A quasiregular region is observed at low excitation energies in a bounded domain of the control parameter on the deformed side of the shape phase diagram, and another one at higher energies around the transition between spherical and deformed shapes. We also demonstrate a tendency for overall suppression or enhancement of chaos with angular momentum, depending on the values of control parameters.

PACS numbers: 21.60.Ev, 05.45.Pq

I. INTRODUCTION

Affiliation to the regular, chaotic, or mixed class of dynamics represents an essential feature of any physical system [1]. While the definition of chaos is primarily derived from the instability of classical motions, expressing the organization of trajectories in the phase space, the term “quantum chaos” [2] refers to some quantum properties—most commonly specific short- and long-range correlations in spectra of energy eigenvalues—that usually accompany the classical chaoticity. Intense study of these properties in the last decades made it possible to extend the notion of chaos from macroscopic systems to small quantum objects like atoms or nuclei.

Historically, nuclear physics offered the first confrontation of ideas related to quantum chaos with experimental data. It was when sequences of neutron resonances with a fixed spin and parity J^π were shown to agree with spectral correlations predicted by the random-matrix theory [3]. The persistence of the same kind of statistics was subsequently demonstrated [4] also for ensembles of low-energy nuclear levels (although in this case also serious deviations from chaotic correlations were detected in some families of states, particularly the collective states with $J^\pi = 2^+$ and 4^+ in even-even nuclei). Possible existence of chaotic layers of dynamics was recently discussed [5] even in connection with ground states of nuclei—in the analysis of fluctuating properties of nuclear masses.

All these data suggest that atomic nuclei at low energies exhibit a variable mixture of regular and chaotic dynamical aspects. However, very little is known about the principal mechanisms that control the competition between both types of motions. Several possible sources of irregularity—diffuseness of the nuclear surface [6], spin-orbit coupling [7], deformations of higher multipolarities [8]—can be identified already on the mean-field level, but the most substantial effects are supposed to result from residual interactions, which, however, are too difficult for explicit analysis.

A viable alternative to the attempts to solve the nuclear many-body problem in its full complexity is the use

of simplified models that capture only some essential dynamical features of nuclei in various regimes [9]. Since residual interactions are responsible for highly correlated collective modes of motions (complementary to single-particle modes), one may try to search for signatures of regularity and chaos in the known elementary collective models, such as the Interacting Boson Model (IBM) [10] or the Geometric Collective Model (GCM) [11, 12]. This approach was pioneered by Alhassid *et al.* [13] and by Paar *et al.* [14] using the IBM, and later followed by Cejnar and Stránský [15] using the GCM. In spite of apparent simplicity of both IBM and GCM approximations, surprising variability and complexity of the existing types of collective modes was disclosed. It turned out that nuclear collective motions belong to the most interesting cases of dynamics on the border between *Sphairos* and *Chaos* [16].

In the IBM it was expected that chaos resides in those regions of the structural triangle where the Hamiltonian is not integrable, i.e., away from the dynamical-symmetry limits and from the $[U(5)-O(6)]\supset O(5)$ transitional path. There is, however, one important and unexpected exception to this prediction: the “arc” of semiregular behavior connecting the $U(5)$ and $SU(3)$ vertices through the triangle interior [13]. The arc was detected by using both classical and quantum measures of chaos, and later also shown to exhibit an increased localization of the associated eigenfunctions in the dynamical-symmetry bases [17]. Most recently it was argued that specific nuclei seem to be placed in (or very close to) the locus of the arc [18], raising the question whether collective dynamics is indeed more regular in these nuclei. The answer as well as an explanation of the emergence of order inside the triangle (a kind of hidden or partial symmetry?) remain unknown.

The analysis of *classical* chaos in the GCM [15], as well, discovered an “island” of increased regularity in the “sea” of chaos corresponding to the neighboring parameter domains. It was shown that when perturbing the integrable γ -soft GCM Hamiltonian by including the $\beta^3 \cos 3\gamma$ potential term with an increasing strength,

chaos at first quickly sets in, but later—in the middle of the non-integrable domain—new types of regular orbits arise which almost completely expel the previously dominant chaotic types of motions in a certain limited region. The effect was found to strongly depend on energy.

The GCM basically represents an infinite- N limit of the IBM, but in its truncated form it involves only the most essential terms of the collective Hamiltonian (in contrast to the IBM which contains rather complicated kinetic terms). The conceptual simplicity of the GCM—for zero angular momentum it is a direct generalization of the famous Hénon-Heiles model [19], an archetypal example of classical chaos in two dimensions—and the possibility to directly visualize its classical dynamics make this model well suited for studies seeking the principal origin of chaotic and regular behaviors in nuclear collective dynamics.

In this paper, we present an extended survey of regular and chaotic properties of the classical GCM. Our aim is to demonstrate a vast variety of dynamical modes contained in a simple form of the model, which is in sharp contrast with its illusive triviality. Let us stress that the primary focus of this work is to investigate the dominant features of the GCM dynamics in all (also unrealistic) energy regimes, the practical impact on low-energy nuclear data being left for another study.

The text is organized as follows: In Sec. II we discuss basic features of the model, in particular, its scaling properties, phase diagram, form of angular momentum \mathbf{J} , and equations of motions. Results of our numerical study of classical chaos are then presented in Sec. III. In Subsec. III A, we show examples of regular and chaotic trajectories and Poincaré sections in the reduced 4-dimensional phase space corresponding to $\mathbf{J} = 0$, and analyze the degree of chaos as a function of the essential free parameter A and energy E . The case of $\mathbf{J} \neq 0$ is studied in Subsec. III B, using chaotic measures based on the unreduced phase space. Summary and conclusions come in Sec. IV.

II. CLASSICAL GEOMETRIC COLLECTIVE MODEL

A. Lagrangian

The dynamics of nuclear quadrupole deformations is described by quadrupole variables α that form a spherical tensor of rank $\lambda = 2$. The meaning of collective coordinates is usually introduced via expansion of the nuclear radius into a series of spherical harmonics (the quadrupole tensor α being associated with the coefficients at $Y_{2\mu}$), but it can also be connected to quadrupole moments of nuclear mass or charge distribution, or to another observable describing the quadrupole shape (hence the restriction to $\lambda = 2$). We do not want to insist on either of these interpretations since possible physical meaning of α will be severely restricted by the truncation of

the expressions for kinetic and potential energy (see below). In particular, the interpretation through the radius expansion is not realistic in the present study where we allow for large-amplitude motions.

The components α_μ (with $\mu = -2, \dots, 2$) of the quadrupole tensor satisfy the relation $\alpha_{-\mu}^* = (-1)^\mu \alpha_\mu$, resulting from Hermiticity, which implies that α_0 is real and α_μ for $\mu \neq 0$ involve 2 independent complex coordinates $\alpha_{1,2} = \alpha_{1,2}^R + i\alpha_{1,2}^I$. Thus the quadrupole nuclear shape is at any time t described by five real numbers $\{\alpha_0, \alpha_1^R, \alpha_1^I, \alpha_2^R, \alpha_2^I\}$. These coordinates can be transformed in such a way that 2 of them express the deformation of the nuclear shape in the principal body-fixed frame, while the remaining 3 coincide with Euler angles determining the orientation of the deformed nucleus in the laboratory frame. The two shape coordinates are related to the only two independent scalar combinations of the quadrupole tensor [20], namely $[\alpha \times \alpha]^{(0)}$ and $[[\alpha \times \alpha]^{(2)} \times \alpha]^{(0)}$, where $[\bullet \times \bullet]^{(\lambda)}$ stands for coupling of the quantities involved to angular momentum λ .

Below we deal with the potential energy terms up to the fourth power in α_μ , and only with the lowest kinetic energy term quadratic in $\dot{\alpha}_\mu$ (the dot stands for time derivative). Considering Lagrangian $L = T - V$ we get

$$\begin{aligned}
 V = & A \underbrace{\sqrt{5} [\alpha \times \alpha]^{(0)}}_{\mathcal{V}_A \equiv (\alpha_0^2 + 2|\alpha_1|^2 + 2|\alpha_2|^2)} \\
 & - B \underbrace{\sqrt{\frac{35}{2}} [[\alpha \times \alpha]^{(2)} \times \alpha]^{(0)}}_{\mathcal{V}_B \equiv \left\{ \alpha_0 (\alpha_0^2 + 3|\alpha_1|^2 - 6|\alpha_2|^2) \right.} \\
 & \left. + 3\sqrt{6} [(\alpha_1^{R2} - \alpha_1^{I2}) \alpha_2^R + 2\alpha_1^R \alpha_1^I \alpha_2^I] \right\}} \\
 & + C \underbrace{5 ([\alpha \times \alpha]^{(0)})^2}_{\mathcal{V}_C \equiv (\alpha_0^2 + 2|\alpha_1|^2 + 2|\alpha_2|^2)^2}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 T = & \frac{K}{2} \underbrace{\sqrt{5} [\dot{\alpha} \times \dot{\alpha}]^{(0)}}_{\mathcal{T} \equiv (\dot{\alpha}_0^2 + 2|\dot{\alpha}_1|^2 + 2|\dot{\alpha}_2|^2)} \quad (2)
 \end{aligned}$$

with $\{A, B, C, K\}$ denoting a set of external parameters. The condition $C > 0$ ensures that the system is bound ($\|\alpha\| < \infty$) and has a finite ground-state energy. We also naturally require $K > 0$. In Eqs. (1) and (2), we have defined for further reference shorthand notations $\mathcal{V}_{A,B,C}$ and \mathcal{T} . An interesting perspective on this Lagrangian from the field-theoretical viewpoint can be found in Ref.[21].

It needs to be stressed that since we will consider below also large deformations, the above truncation of the Lagrangian cannot be justified by the smallness of the norm $\|\alpha\| \equiv \max|\alpha_\mu|$. Instead we may assume that the coefficients at higher order terms become negligible. This is, in general, consistent with the convergence requirement set upon the kinetic and potential energy expressions. Moreover, truncated forms (1) and (2) were shown to re-

produce basic experimental data on low-energy collective states in even nuclei [22].

An explicit form of equations of motions trivially follows from the Lagrange equations and will be given (in a more restricted case) in Subsec. II E. Examples of trajectories and a Poincaré section obtained in our numerical calculations for one specific choice of control parameters and the integrals of motions is shown in Fig. 1. Note that introducing the canonical conjugate momenta $\pi_\mu \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\alpha}_\mu} = K \dot{\alpha}_\mu^*$, one can build the Hamiltonian $H = T + V$ and immediately convert to the Hamilton formalism. It should be pointed out, however, that if we allow for higher-order terms in the kinetic energy T , the expression for momenta will contain additional coordinate-dependent terms violating the linearity of the $\pi_\mu \leftrightarrow \dot{\alpha}_\mu^*$ relation.

B. Scaling properties

In the previous subsection, we have defined quantities of three fundamental physical units: unit of deformation tensor α , unit of energy E (or L), and unit of time t . Consider the transformation

$$\alpha = a \bar{\alpha}, \quad L = b \bar{L}, \quad t = c \bar{t}, \quad (3)$$

where $\bar{\alpha}$, \bar{L} , and \bar{t} are quantities in new units, fixed by constants a , b , and c . Denoting

$$\bar{K} = \frac{a^2}{bc^2} K, \quad \bar{A} = \frac{a^2}{b} A, \quad \bar{B} = \frac{a^3}{b} B, \quad \bar{C} = \frac{a^4}{b} C \quad (4)$$

(we assume that none of these expressions is singular), one obtains a transformed Lagrangian \bar{L} of the same form as above,

$$\bar{L} = \frac{\bar{K}}{2} \bar{T} - \bar{A} \bar{V}_A - \bar{B} \bar{V}_B - \bar{C} \bar{V}_C, \quad (5)$$

where expressions for \bar{T} and $\bar{V}_{A,B,C}$ are those from Eqs. (1) and (2), but with substitutions from (α, t) to $(\bar{\alpha}, \bar{t})$. Without the loss of generality, the units can therefore be chosen such that three out of the four parameters $\{A, B, C, K\}$ become equal to unity, while the remaining parameter takes the role of the only external variable. In particular, we have the following possibilities:

(i) *Scaling with parameter \bar{A}* : If we require $\bar{K} = \bar{B} = \bar{C} = 1$, Eq. (4) yields

$$a = \frac{B}{C}, \quad b = \frac{B^4}{C^3}, \quad c = \frac{\sqrt{KC}}{B}. \quad (6)$$

This can be done only if $B, C \neq 0$ and $KC \geq 0$, where the last two conditions are naturally satisfied since $K, C > 0$.

(ii) *Scaling with parameter \bar{B}* : Having $\bar{K} = |\bar{A}| = \bar{C} = 1$ with $\bar{A} = +1$ for $A > 0$ and $\bar{A} = -1$ for $A < 0$ we obtain expressions similar to those in Eq. (6). We require $A, C \neq 0$.

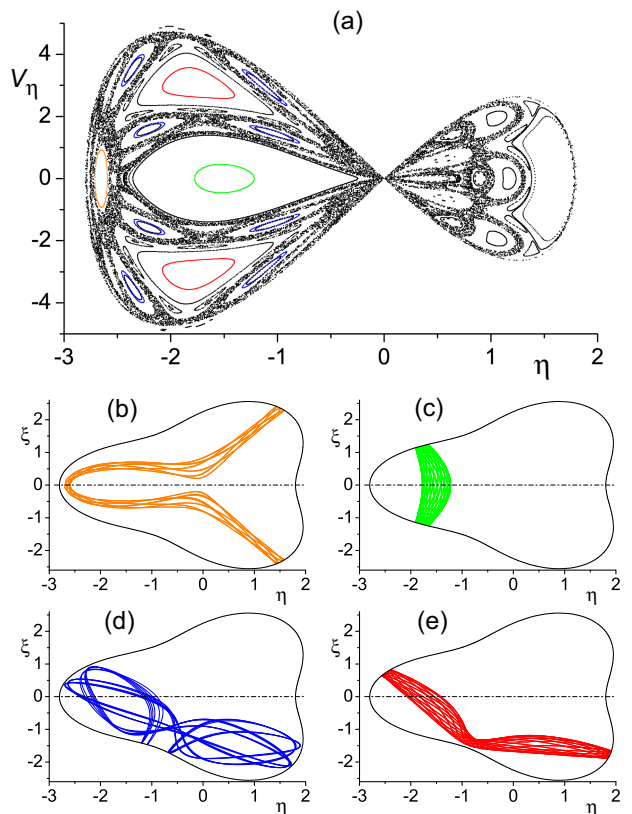


FIG. 1: (color online) An example of the GCM dynamics for Lagrangian parameters $A = -5.05$, $B = C = K = 1$, absolute energy $E = 0$, and angular momentum $\mathbf{J} = 0$. For $\mathbf{J} = 0$, only the coordinates α_0 and α_2^R and the corresponding velocities represent active state variables, while the others can be set to zero, see Sect. II D. Panel (a) shows a so-called Poincaré section of the 4-dimensional phase space at $\alpha_2^R = 0$. We denote $\eta \equiv \alpha_0$, $v_\eta \equiv \dot{\eta}$. Each dot corresponds to the passage of one trajectory through the plane (in this figure we show altogether 50000 such crossings of 52 randomly chosen trajectories). In panels (b)–(e), we exemplify some regular trajectories contributing to the phase portrayal in panel (a), the plane of section being represented by the horizontal line. The evolution time was set to 50 time units (connected with the scaling constant c , see Subsec. II B).

(iii) *Scaling with parameter \bar{C}* : In this case $\bar{K} = |\bar{A}| = \bar{B} = 1$ we have again $\bar{A} = +1$ for $A > 0$ and $\bar{A} = -1$ for $A < 0$, provided that $A, B \neq 0$.

Since the scaling does not change physical content, the above construction shows that the classical GCM has just *one* essential control parameter, which can be chosen from the set $\{\bar{A}, \bar{B}, \bar{C}\}$. Note that the combination $\frac{AC}{B^2}$ is invariant for all parametrizations, see Eq. (4). In the following, we will always use one of the possibilities (i)–(iii). For the sake of brevity, the bar above the transformed quantities will be skipped.

Let us note that the idea of scaling has been invoked also in the quantum GCM [23], but in this case there exist *two* essential parameters. This is because a fixed

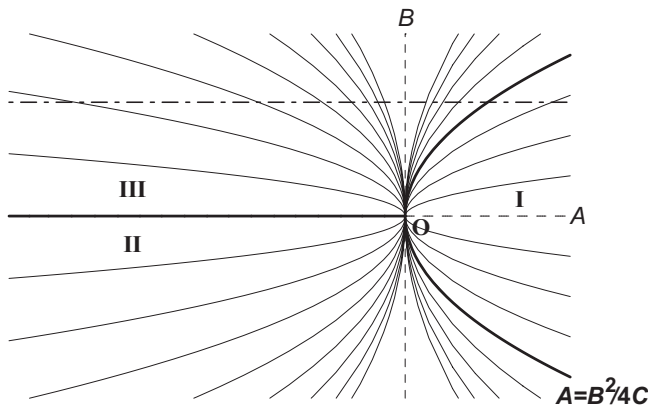


FIG. 2: The GCM phase diagram in the plane of parameters A and B for any $C > 0$. Thick lines represent phase separatrices (first-order) between spherical (I), prolate (II) and oblate (III) axially symmetric equilibrium shapes, O is the triple point (continuous transition). Thin parabolae (without point O) correspond to dynamically equivalent parameter sets related by scaling transformations (Subsec. II B).

value of the quantization constant (\hbar) connects units of time and energy, so that one can independently vary only one of these two scales. More generally, analogous considerations can be applied to any (classical or quantum) physical system with external parameters.

C. Phase diagram

In the research of collective dynamics, considerable effort is focused on signatures of shape-phase transitions in nuclei (see, e.g., Ref. [24] and references therein). Although these effects are not of the primary concern in this work, the knowledge of the GCM phase structure is an important prerequisite for what will follow.

An isolated classical system is in a stable equilibrium if its potential energy takes the lowest possible value. In a close vicinity of the minimum, the potential can be approximated by a quadratic form, implying that low-energy motions tend to be regular. The position of the global minimum determines the main features of the system at low energies. While changing the control parameters of the potential, the minimum can vary in a non-analytic way, which leads to “phase-transitional” changes of the system’s properties. In agreement with the Landau theory of phase transitions [25], a discontinuous change of the position of the minimum may be identified with a first-order phase transition, while a continuous but non-smooth evolutions lead to second- or higher-order phase changes.

The system described by potential (1) exhibits a first-order phase transition when crossing the line $B = 0$ at $A < 0$. At this phase separatrix, the minimum characterized by $\|\alpha\| > 0$ with $\mathcal{V}_B < 0$ (valid for $B > 0$) jumps to another one, characterized by the same $\|\alpha\|$

but $\mathcal{V}_B > 0$ (valid for $B < 0$). It will become clear below that this transition changes an oblate axially symmetric equilibrium shape ($B > 0$) to a prolate one ($B < 0$). Another first-order phase transition is located at $A = \frac{B^2}{4C}$ for $B \neq 0$, where the global minimum with $\|\alpha\| > 0$ jumps to $\|\alpha\| = 0$. This is a transition from deformed ($A < \frac{B^2}{4C}$) to spherical ($A > \frac{B^2}{4C}$) equilibrium shapes. Both deformed and spherical local minima of the potential coexist in the interval $0 \leq A \leq \frac{9B^2}{32C}$. At the intersection $A = B = 0$ of the prolate-oblate and deformed-spherical first-order phase separatrices, the phase coexistence interval shrinks into a single point and the phase changes becomes continuous, of the second order.

The phase diagram in the plane $A \times B$ for $C = \text{const}$ is depicted in Fig. 2. In Subsec. II B we showed that parameters A , B , and C can be related by scaling transformations. Indeed, the parabolic curves in Fig. 2 connect points within the same class of equivalence defined by Eq. (4) with $\bar{C} = C$. For instance, the horizontal dot-and-dash line corresponding to the variable- A parametrization (i) crosses all non-equivalent configurations with $B \neq 0$ (the $B = 0$ case is removed to $\bar{A} \rightarrow \pm\infty$). The variable- B parametrizations (ii), on the other hand, crosses all configurations with the same sign of A (the $A = 0$ case corresponding to $\bar{B} \rightarrow \pm\infty$).

D. Angular momentum

The introduction of angular momentum substantially simplifies the analysis of the GCM dynamical properties. It is defined as the spherical tensor of rank $\lambda = 1$ through the following expression [12]:

$$J_\mu = i\sqrt{10} [\alpha \times \pi^*]_\mu^{(1)} = iK\sqrt{10} [\alpha \times \dot{\alpha}]_\mu^{(1)}. \quad (7)$$

In the Cartesian frame we have $J_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (J_x \pm iJ_y)$, $J_0 = J_z$, which leads to

$$J_x = -\sqrt{2}K \left[\sqrt{2} (\alpha_1^I \dot{\alpha}_2^R - \dot{\alpha}_1^I \alpha_2^R + \dot{\alpha}_1^R \alpha_2^I - \alpha_1^R \dot{\alpha}_2^I) + \sqrt{3} (\dot{\alpha}_0 \alpha_1^I - \alpha_0 \dot{\alpha}_1^I) \right], \quad (8)$$

$$J_y = \sqrt{2}K \left[\sqrt{2} (\dot{\alpha}_1^R \alpha_2^R - \alpha_1^R \dot{\alpha}_2^R + \dot{\alpha}_1^I \alpha_2^I - \alpha_1^I \dot{\alpha}_2^I) + \sqrt{3} (\dot{\alpha}_0 \alpha_1^R - \alpha_0 \dot{\alpha}_1^R) \right], \quad (9)$$

$$J_z = -2K [\dot{\alpha}_1^R \alpha_1^I - \alpha_1^R \dot{\alpha}_1^I + 2 (\dot{\alpha}_2^R \alpha_2^I - \alpha_2^R \dot{\alpha}_2^I)], \quad (10)$$

or to equivalent expressions with linear momenta π_μ .

Note that the definition (7) is consistent with fundamental physical assumptions. Introducing Poisson brackets for arbitrary complex differentiable functions f and g in the GCM phase space,

$$\{f, g\} = \sum_{\mu=-2}^2 \left(\frac{\partial f}{\partial \alpha_\mu} \frac{\partial g}{\partial \pi_\mu} - \frac{\partial g}{\partial \alpha_\mu} \frac{\partial f}{\partial \pi_\mu} \right), \quad (11)$$

where the derivatives are meant in the sense of complex variables, e.g., $\frac{\partial f}{\partial \alpha_\mu} = \frac{\partial f}{\partial \alpha_\mu^R} = -i \frac{\partial f}{\partial \alpha_\mu^I}$, one can verify that the angular momentum satisfies the required basic relations

$$\begin{aligned} \{J_i, J_j\} &= \epsilon_{ijk} J_k, \quad i, j, k = x, y, z, \\ \{J_\pm, \alpha_\mu\} &= -i\alpha^{(\pm)}(2, \mu) \alpha_{\mu \pm 1}, \\ \{J_3, \alpha_\mu\} &= -i\mu \alpha_\mu, \quad \mu = -2, \dots, +2, \end{aligned} \quad (12)$$

where ϵ_{ijk} stands for the antisymmetric tensor, $J_\pm = J_x \pm iJ_y$, and $\alpha^{(\pm)}(\lambda, \mu) = \sqrt{(\lambda - \mu)(\lambda + \mu + 1)}$. Formulae in Eq. (12) have the same form as the standard quantum-mechanical commutation relations, in agreement with the general classical–quantum correspondence.

Due to spherical symmetry of the Lagrangian, the angular momentum components (8)–(10) are conserved, $\dot{J}_i = 0$ (where $i = x, y, z$), which can be explicitly verified. The rotational invariance enables one to choose—without the loss of generality—the coordinate system such that the angular momentum is parallel with one of the axes, say z . The $J_x = J_y = 0$ condition can be achieved by the requirement

$$\alpha_1^R = \dot{\alpha}_1^R = \alpha_1^I = \dot{\alpha}_1^I = 0, \quad (13)$$

cf. Eqs. (8) and (9), which yields

$$J_z = 4K (\alpha_2^R \dot{\alpha}_2^I - \dot{\alpha}_2^R \alpha_2^I). \quad (14)$$

We will see in Subsec. IIF that under these circumstances angular momentum J_z generates just a steady rotation around one of the principal axes without any non-stationary rotational effects. In the following, nevertheless, we will restrict ourselves to the simplified case of Eq. (13), leaving the most general analysis as a future challenge.

The special case of $\mathbf{J} \equiv (J_x, J_y, J_z) = 0$ implies either $\alpha_2^R = \dot{\alpha}_2^R = 0$, or $\alpha_2^I = \dot{\alpha}_2^I = 0$, besides Eq. (13). These are two equivalent choices. In the following, we will use the latter alternative.

E. Equations of motions

It is known that quadrupole vibrations with $\mathbf{J} = 0$ are fully characterized by Bohr parameters β and γ describing the deformation in the principal axes system [9]. While $\beta \geq 0$ measures the degree of deformation, γ determines the shape type and the degree of triaxiality (the ellipsoid describing the deformation is triaxial except γ equal to even or odd multiples of $\frac{\pi}{3}$, attributed to prolate or oblate axially symmetric shapes, respectively).

Bohr coordinates can be easily generalized to cases with non-zero angular momentum J_z under the restriction of Eq. (13). Indeed, defining new variables (β, γ, δ) ,

$$\begin{aligned} \sqrt{2}\alpha_2^R &\equiv \xi = \overbrace{\beta \sin \gamma \cos \delta}^{\rho}, & \beta, \rho &\in [0, \infty), \\ \sqrt{2}\alpha_2^I &\equiv \zeta = \beta \sin \gamma \sin \delta, & \gamma &\in [0, \pi), \\ \alpha_0 &\equiv \eta = \beta \cos \gamma, & \delta &\in [0, 2\pi), \end{aligned} \quad (15)$$

we see that the Lagrangian given by Eqs. (1) and (2) receives a very simple form

$$V = A\beta^2 + B\beta^3 \cos 3\gamma + C\beta^4, \quad (16)$$

$$T = \frac{K}{2} (\dot{\beta}^2 + \beta^2 \dot{\gamma}^2 + \beta^2 \dot{\delta}^2 \sin^2 \gamma). \quad (17)$$

Note that (β, γ, δ) and (ρ, δ, η) , respectively, are spherical and cylindrical coordinates associated with the Cartesian system (ξ, ζ, η) , see Eq. (15).

Since angular momentum (14) reads as

$$J_z = 2K(\xi\dot{\zeta} - \dot{\xi}\zeta) = 2K\beta^2\dot{\delta}\sin^2\gamma = 2K\rho^2\dot{\delta}, \quad (18)$$

the Lagrangian in Eqs. (16) and (17) can be viewed as if it describes a particle moving in potential V subject to the centrifugal barrier $\propto \frac{J_z^2}{\rho^2}$. Equations of motions receive the following form:

$$K\ddot{\eta} = -2A\eta - 3B(\eta^2 - \rho^2) - 4C\eta(\rho^2 + \eta^2)^2, \quad (19)$$

$$K\ddot{\rho} = -2\rho [A - 3B\eta + 2C(\rho^2 + \eta^2)], \quad (20)$$

$$K \frac{d}{dt} (\rho^2 \dot{\delta}) = 0. \quad (21)$$

While coupled equations (19) and (20) determine the motion in the $\rho \times \eta$ plane, the evolution of angle δ can be calculated from Eq. (21), equivalent to $\dot{J}_z = 0$, without further differentiation.

The centrifugal term in Eq. (17) can be identified with the energy of rotation $T_{\text{rot}} = \frac{J_z^2}{2\mathcal{I}_z}$, defining the moment of inertia

$$\mathcal{I}_z = 4K\rho^2, \quad (22)$$

cf. Refs.[9, 12]. This is consistent with the relation $\delta = 2\varphi_z$ (thus $J_z = \mathcal{I}_z \dot{\varphi}_z$), where φ_z is the angle of rotation about axis z in the real space (x, y, z) . In particular, a half rotation by $\varphi_z = \pi$ in the real space realizes the full rotation by $\delta = 2\pi$ in the model space (ξ, ζ, η) , in agreement with discrete symmetries of the ellipsoid of deformation [9].

Because moment of inertia (22) depends on the deformation coordinate $\rho = \beta \sin \gamma$, it varies during the evolution. In particular, it is evident that $\mathcal{I}_z = 0$ if the shape becomes symmetric around the rotational axis (i.e., in our case, if $\gamma = 0$ or π , or $\beta = 0$). This general property of the GCM holds independently from the degree of truncation of the kinetic-energy expression and follows from the kinematic restriction imposed by the description of the nuclear droplet solely via the quadrupole tensor [9].

F. Principal axes system

The quadrupole deformation tensor α can be also expressed in its Cartesian (x, y, z) components via standard

relations [12]

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= \frac{1}{\sqrt{6}} \sqrt{\frac{8\pi}{15}} (2\alpha_{zz} - \alpha_{xx} - \alpha_{yy}), \\ \alpha_{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{8\pi}{15}} (\alpha_{xz} \pm i\alpha_{yz}), \\ \alpha_{\pm 2} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{15}} (\alpha_{xx} - \alpha_{yy} \pm 2i\alpha_{xy}).\end{aligned}\quad (23)$$

The Cartesian matrix α is real, symmetric, and satisfies an additional constraint $\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz} = 0$ following from the fact that the trace of any Cartesian tensor is conserved in rotations and can be set to zero. Diagonalization of α at any time t represents a transformation to the instantaneous principal frame of the deformed shape. In this way, one can separate parts of the quadrupole tensor that describe deformation and rotation, which makes it possible to analyze the evolution of deformation under the influence of rotation.

For $\mathbf{J} = (0, 0, J_z)$ with constraint (13) the Cartesian matrix α has a block-diagonal form

$$\alpha = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \begin{pmatrix} \xi - \frac{1}{\sqrt{3}}\eta & \zeta & 0 \\ \zeta & -\xi - \frac{1}{\sqrt{3}}\eta & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{3}}\eta \end{pmatrix}. \quad (24)$$

The first block of matrix (24) is diagonalized with the aid of transformation $\begin{pmatrix} \cos \varphi_z & \sin \varphi_z \\ -\sin \varphi_z & \cos \varphi_z \end{pmatrix}$, which is but a rotation by φ_z in the ordinary space (equivalent to a rotation by $\delta = 2\varphi_z$ in the model space). This shows that ansatz (13) leads to rotations around axis z in the body-fixed system, as indicated above. The eigenvalues $\lambda_{1,2,3}$ of matrix (24) can be determined analytically:

$$\begin{aligned}\lambda_{1,2} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \beta \cos \left(\gamma \pm \frac{2\pi}{3} \right), \\ \lambda_3 &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \beta \cos \gamma.\end{aligned}\quad (25)$$

We see that the eigenvalues do not depend on δ , so the deformation in the body-fixed frame is described solely by coordinates β and γ .

Although formulae in Eq. (25) remain the same regardless of whether $\mathbf{J} \neq 0$ or $\mathbf{J} = 0$, there is one important distinction between these two cases. Since the difference of the first two eigenvalues can be expressed through

$$(\lambda_1 - \lambda_2)^2 = \frac{15}{8\pi K} \frac{J_z}{\delta}, \quad (26)$$

we see that for $J_z \neq 0$ there must be a minimal distance $|\lambda_1 - \lambda_2|$ determined by the maximal angular frequency δ allowed for a given energy and angular momentum (as follows from the centrifugal barrier). This is in contrast with the $\mathbf{J} = 0$ case, when the eigenvalues can cross without any restriction. In Subsec. III B, we will discuss an important consequence of this rotation-induced “no-crossing rule”.

III. NUMERICAL RESULTS

A. Motions with $\mathbf{J} = 0$

In this subsection we will analyze the degree of regularity of the motions generated by Eqs. (19)–(20) for zero angular momentum, i.e., $\dot{\delta} = 0$. Without the loss of generality one can set $\delta = 0$, converting Eq. (15) to standard Bohr coordinates. We will use the Lagrangian parametrization (i) with $B = 1$ and variable A (Subsec. II B), which is advantageous if one wants to follow the transition from deformed to spherical equilibrium shapes via the phase-coexistence region, see the dot-and-dash line in Fig. 2. (The parametrization with variable B for $A = -1$, as discussed in Ref. [15], will be used in Subsec. III B.) We start by introducing an appropriate measure of the degree of regularity, and then discuss concrete numerical results.

The system’s phase space for $\mathbf{J} = 0$ is effectively 4-dimensional which means that trajectories with fixed values of energy lie on 3D manifolds. As classical trajectories do not cross each other, each point of the 2D Poincaré section of the phase space [1] is passed just by one trajectory. With $J_z \neq 0$, however, the effective dimension of the phase space increases to 6 and the uniqueness of the 2D mapping of trajectories gets lost. The effect of increasing angular momentum is illustrated in Fig. 3, where we show the $\eta \times \dot{\eta}$ plane for $\xi = 0$ and $E = 24.4$ energy units. Panel (a) depicts the situation with $J_z = 0$ while panels (e)–(g) correspond to $J_z \neq 0$. For zero angular momentum, the image (a) really represents a section of the phase space, but as J_z increases each point of the portrayal is visited by infinite number of orbits.

Trajectories in the phase space of an integrable system with 2 degrees of freedom lie on surfaces that are topologically equivalent to 4D tori. In crossings with Poincaré sections such tori form sets of 1D curves (ovals) which are covered by passages of individual trajectories (periodic orbits create just sequences of isolated points on these curves). On the contrary, a fully chaotic system is subject to the ergodic principle which ensures that orbits uniformly cover the whole kinematically accessible area of the Poincaré section.

In intermediate cases—for partially chaotic/regular systems—the randomly covered areas in the Poincaré section coexist with regular islands, remnants of tori. This is demonstrated in Fig. 3(a) where the interplay of regular and chaotic motions gives rise to a rather sophisticated pattern of small and large tori (examples of some regular orbits contributing to individual islands are displayed in panels b–d). Since potential (16) is manifestly invariant under the transformation $\gamma \rightarrow \gamma \pm \frac{2}{3}\pi$, the trajectories in the $\xi \times \eta$ plane can be rotated by 120° , which affects the structure of Poincaré sections. For instance, while the orbits of the type shown in panel (b) contribute to the fish-like regular areas placed symmetrically with respect to $\dot{\eta} = 0$ in section (a), the corresponding rotated trajectory passes through the lower central regular area.

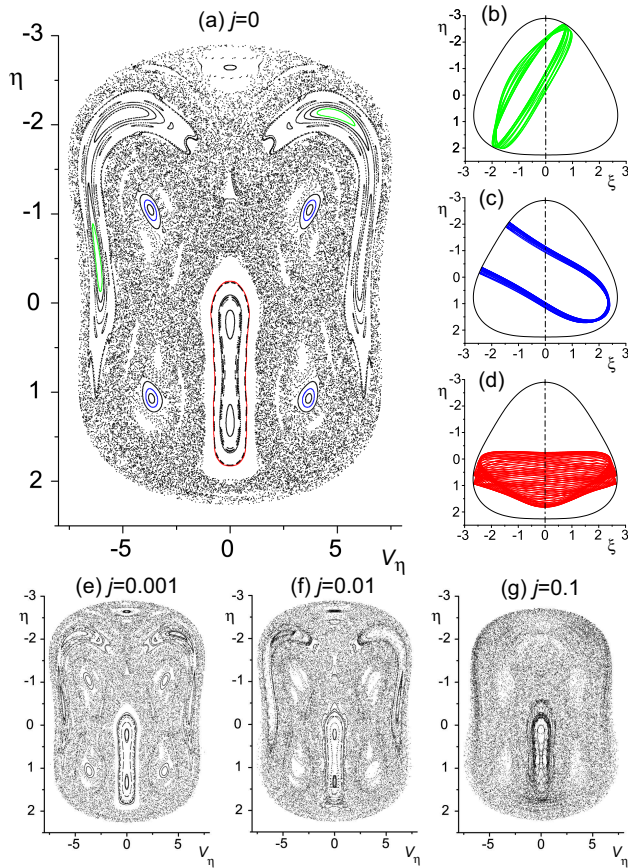


FIG. 3: (color online) Panel (a) shows the $\xi = 0$ Poincaré section (cf. Fig. 1) with 52 randomly chosen trajectories for $A = -2.6$ at $E = 24.4$. Panels (b)–(d) exemplify three regular orbits that evolve for 30 (panels b and c) or 75 (panel d) time units. In panels (e)–(g) the system from panel (a) is subject to rotations with increasing angular momentum $j = \frac{J_z}{J_{\max}}$ (see Subsec. III B). We see that the patterns (e.g., a pair of “fish”) present in Poincaré section (a) gradually disappear as the $\eta \times \dot{\eta}$ plane ceases to uniquely characterize the $\xi = 0$ section of the phase space for $j > 0$.

Following Ref. [15], we will quantify the degree of regularity in case of $\mathbf{J} = 0$ by a relative fraction of regular islands in the Poincaré section. More specifically, we introduce the ratio

$$f_{\text{reg}} = \frac{S_{\text{reg}}}{S_{\text{tot}}}, \quad (27)$$

where S_{reg} is the area corresponding to all regular islands in the $\xi = 0$ Poincaré section and S_{tot} is the total kinematically accessible area (regular and ergodic) of the same section. Fraction (27) may change between limiting values 0 (complete chaos) and 1 (perfect order) as the external control parameter A and energy E vary. An alternative measure of regularity will be discussed in Subsec. III B.

In an ideal case, f_{reg} would be determined through dividing the total area of the section into an infinite grid

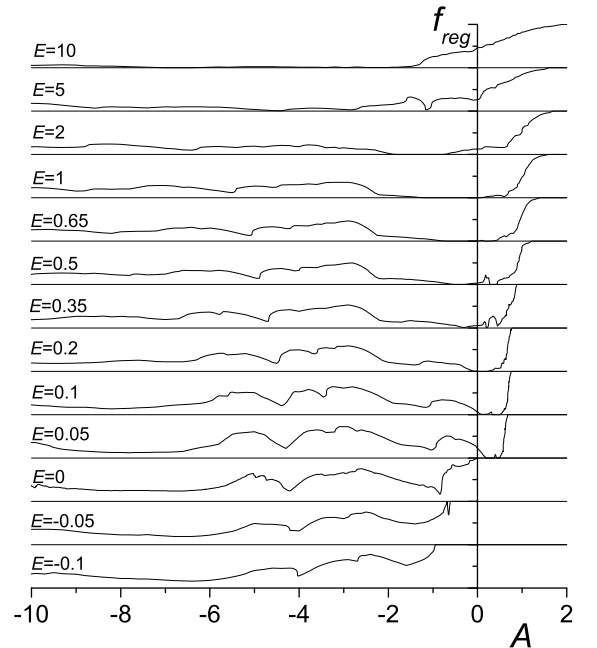


FIG. 4: Regular fraction (27) as a function of the control parameter A in scaling (i) for various values of energy E . The shown range of f_{reg} covers the whole definition interval $[0, 1]$.

of cells and labeling each cell according to whether it is crossed by a regular or chaotic trajectory. With a finite grid, some systematic errors are unavoidable, but their size decreases (if excluding some pathological situations) with increasing resolution. In the present case, we have analyzed passages of 120 randomly chosen trajectories through a grid of 300×300 cells covering the whole section. The trajectories for which the number of cells passed during the selected time of evolution was less than k times the perimeter of the kinematically accessible area (number of cells forming the boundary) were declared regular, while the others were considered chaotic. This criterion is related to the expectation that passages of regular trajectories through the section form effectively 1D manifolds; the value of k suitable for the presently analyzed case was set heuristically. Our empirical way of sorting the trajectories results in some systematic errors (maximal for $f_{\text{reg}} \approx 1$) which, however, do not exceed 5%.

The dependence of the fraction f_{reg} on A for several energies $-0.1 \leq E \leq 10$ is plotted in Fig. 4, and the dependence of f_{reg} on E for a few values of the control parameter A is shown in Fig. 5. Note that similar dependences (but in the variable- B parametrization with $A = -1$) were discussed also in Ref. [15]. While the behaviors observed in asymptotic regimes $A \rightarrow \pm\infty$ (cf. Fig. 4), and at $E \approx E_{\min}$ and $E \rightarrow \infty$ (Fig. 5) can

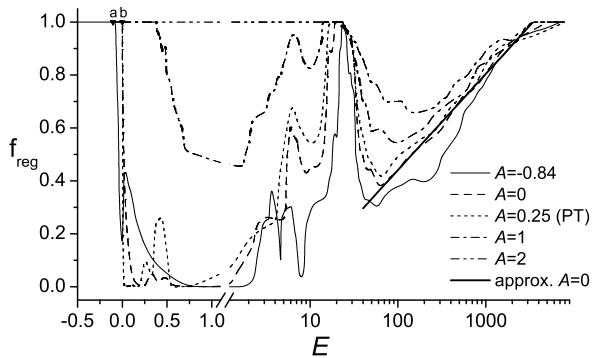


FIG. 5: Regular fraction (27) as a function of energy E for several values of the control parameter A in scaling (i). More dependences for $A < 0$ were given in Ref. [15]. Minimal energies for $A = 0$ and $A \geq \frac{1}{4}$ are $E_{\min} = -0.105$ (symbol ‘a’) and $E_{\min} = 0$ (symbol ‘b’), respectively. The thick full line represents a logarithmic approximation $f_{\text{reg}} = 0.363 \log_{10} E - 0.285$ valid at high excitation energies with $A = 0$.

be understood from simple general arguments, discussed below, the temporal increase of regularity in the intermediate domains of both A and E represents a rather surprising, unexpected feature of the system.

Recall first that the system is fully regular for $A \rightarrow -\infty$ as in the scaling with parameter B this limit corresponds to integrable case with $V = \beta^4 - \beta^2$, see Subsec. II B. The associated increase of f_{reg} is, however, away from the range shown in Fig. 4, where we rather observe that the degree of regularity is low for large negative values of A . Similarly, in the $A \rightarrow +\infty$ limit the system becomes identical with the integrable quartic oscillator $V = \beta^4 + \beta^2$. Indeed, it can be observed in Fig. 4 that as A increases, one eventually crosses a certain point $A_{\text{reg}}(E)$, above which the fraction f_{reg} becomes equal to 1. In particular, we see that $A_{\text{reg}}(0) = 0$ which indicates that the absolute energy $E = 0$ plays a special role (in the parametrization with variable B the $A = 0$ case corresponds to the limit $B \rightarrow \infty$ where the dynamics is therefore fully regular for $E \leq 0$ [15]).

A temporal increase of regularity in the intermediate range approximately $A \in (-6, -2)$ for $E \leq 1$ is probably related to a similar suppression of chaos detected within the “regular arc” inside the dynamical-symmetry triangle of the interacting boson model [13]. This connection can be deduced from similarities of the GCM and IBM Poincaré sections in the respective parameter domains [26]. However, since the IBM on the classical level has two essential control parameters, the GCM (with only one parameter) cannot mimic all versions of the IBM dynamics and the regular arc seems to be accessed just at a single place. We intend to return to this issue in the forthcoming article.

We know that in the non-rotating case the GCM system with variable A interpolates between a deformed and

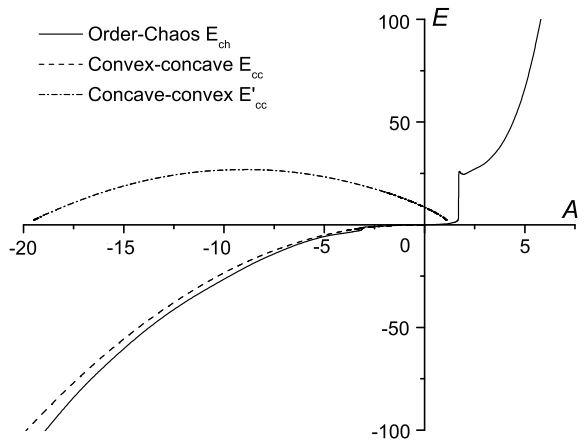


FIG. 6: The lower energy bound $E_{\text{ch}}(A)$ for partially chaotic dynamics is compared with the energy $E_{\text{cc}}(A)$ of the convex-concave transition of the border of kinematically accessible area in the plane of deformation parameters. The curve $E'_{\text{cc}}(A)$ demarcates the change of the concave area back to convex at higher energies.

spherical vibrator. At the phase-transitional point, which in the present case is located at $A = \frac{1}{4}$, the approximation known as the X(5) critical-point dynamical symmetry [27] is often applied, allowing for analytical predictions of quantized level energies and wave functions. The existence of a dynamical symmetry implies integrability of the system. However, the present classical analysis shows that the regularity does *not* increase around the phase transition, just on the contrary, the $A = \frac{1}{4}$ regular fraction at low energies is very small, see Fig. 5. Apparently, the GCM quartic potential does not reasonably approximate the conditions required for the X(5) symmetry.

The dependence of the regular fraction on energy, as illustrated in Fig. 5, is similar to the above-discussed dependence on A . Also in this case there exist some common asymptotic features. At *very small* energies, small-amplitude motions around the global minimum of the potential are regular due to the validity of a local 2D harmonic-oscillator approximation. As the energy rises, f_{reg} remains equal to 1 until a certain point—afterward it drops sharply. It will be shown below that the value $E_{\text{ch}}(A)$ where this happens can be approximately predicted from the form of the potential. For *very large* energies, on the other hand, the value of f_{reg} tends to 1, which can be explained by the fact that the system is more and more affected by the γ -independent quartic term β^4 of potential (16). The increase of regularity in this regime, before the reach of the limit $f_{\text{reg}} = 1$, can be approximated by a logarithmic function, see the thick line in Fig. 5. In the intermediate domain, between the low- and high-energy limits, the regular fraction exhibits a complicated energy dependences with sharp maxima

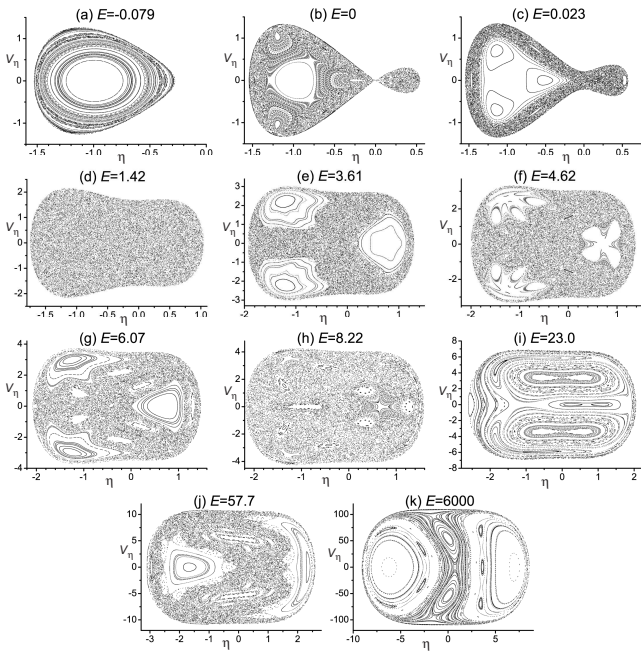


FIG. 7: The $\xi = 0$ Poincaré sections at $A = -0.84$ for various values of energy (panels a–k), which are displayed in Fig. 8.

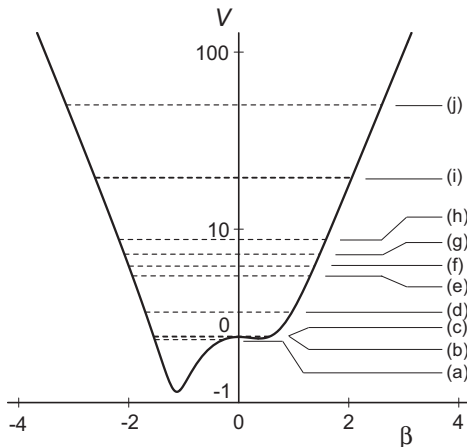


FIG. 8: Potential (16) for $A = -0.84$ with energy levels corresponding to the Poincaré sections shown in Fig. 7. Level (i) corresponds to the intermediate maximum of regularity. The vertical scale is compressed according to $(V + 1)^{1/4}$ which demonstrates the $V \propto \beta^4$ high-energy asymptotics.

($f_{\text{reg}} \approx 1$) appearing in the region $20 < E < 30$.

The dependence of energy E_{ch} of the order-to-chaos transition on parameter A is shown in Fig. 6 (full curve). Also shown there is the energy E_{cc} (dashed curve) which separates the region where the border of the kinematically accessible area in the $\xi \times \eta$ plane (deformation parameters available for trajectories with given energy) is fully *convex* ($E < E_{\text{cc}}$) from the region where it becomes partly *concave* ($E > E_{\text{cc}}$). It is clear that both curves roughly coincide, in analogy with classical billiard sys-

tems [1, 2] where the convex-concave transition triggers the onset of chaos because of divergence of the trajectories reflected on a concave boundary. The small discrepancy between the two separatrices observed in the present case, see Fig. 6, can be assigned to the fact that the GCM—unlike the hard-wall billiard systems—is characterized by a soft, diffuse potential.

Fig. 6 also shows (by the dot-and-dash curve) the upper energy $E'_{\text{cc}}(A)$ where the partly concave boundary of the kinematically accessible area changes back to a fully convex one. It is interesting that approximately at the place where the curve E'_{cc} crosses the value E_{cc} (at $A \approx 1.3$), the dependence $E_{\text{ch}}(A)$ of the low-energy order-to-chaos transition jumps from $E = 0$ to $E \approx 25$. The system becomes regular in very broad low-energy domain. This can be observed also in Fig. 5: for $A \ll 1.3$ there exists a deep valley in f_{reg} at energies within $0 < E < 20$ which gets shallower as A increases. When A crosses the value 1.3, this valley completely disappears. Note that also the remaining chaotic region around $E \approx 100$ is gradually extinguished so that for $A \rightarrow +\infty$ the system exhibits fully regular behavior associated with the quartic-oscillator limit.

We saw that the character of the system's dynamics is predictable for very low and very high energies. On the other hand, very little is known about the nature of the temporal increase of regularity in the intermediate range $20 < E < 30$, see Fig. 5. We have checked that the peak of f_{reg} in this region (with maximal value $f_{\text{reg}} = 1$) first appears at $A \approx -1$, while for $A \approx +1.3$ it changes into the flat structure, as discussed above. Let us note that the maximum does *not* coincide with the energy E'_{cc} from Fig. 6.

In Fig. 7 we show a series of Poincaré sections with a fixed value of $A = -0.84$ (full curve in Fig. 5) for a sequence of energies visualized in the corresponding potential well in Fig. 8. The images in Fig. 7 illustrate all stages of the f_{reg} energy dependence discussed above: regular behavior at very low energies (panel a), the onset of chaos and its competition with regular islands (panels b,c), complete chaotization of the whole phase space (panel d), reappearance of some regular orbits and their fragile coexistence with the chaotic sea (panels e–h), temporal triumph of regularity (panel i), partial chaotization again (panel j), and the fully regular limit (panel k). Indeed, as indicated in Ref. [15], nuclear collective motions (even those with $\mathbf{J} = 0$) represent one of the most striking examples of dynamics between order and chaos.

B. Motions with $J_z > 0$

This subsection is dedicated to numerical results for non-zero angular momentum. It has been shown that the distinction between rotating and non-rotating cases is indeed relevant. First, the rotating case spans a larger phase space, which has some consequences (see, e.g., Fig. 3). Second, evolutions of the deformation in the

rotating case may differ substantially from the corresponding evolutions (with the same initial conditions) in the non-rotating case, regardless of how small the angular momentum actually is. This effect, predicted in Sect. II F, is illustrated in Fig. 9. In panel (a), we compare a pair of $\mathbf{J} = 0$ and $J_z > 0$ trajectories starting at the same point in the deformation plane. The sudden divergence of both evolutions arises from the *non-crossing* of the eigenvalues of the Cartesian matrix α in case of non-zero angular momentum, as shown in panel (b). Panel (c) demonstrates that for $\mathbf{J} = 0$ the pair of eigenvalues exhibits *real crossing*. As the difference emerges for arbitrarily small angular momenta, there is no transitional region between the two distinct modes. We can conclude that the behavior of a rotating system cannot in general be obtained via perturbative corrections of the non-rotating dynamics.

In the following, we will characterize the degree of the

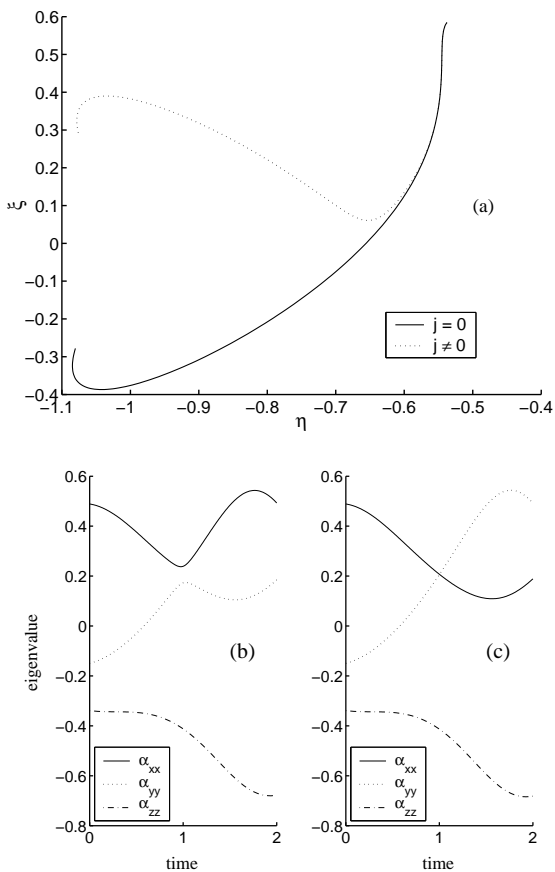


FIG. 9: Comparison of two initially close trajectories in the plane of deformation parameters for zero and non-zero spin (panel a) and the corresponding plot of the quadrupole tensor eigenvalues (panels b and c). The avoided crossing of the eigenvalues at $t \approx 1$ for $J_z \neq 0$ (panel b) is in contrast to the real crossing for $\mathbf{J} = 0$ (panel c), which leads to the sudden divergence of both trajectories shown in panel (a). Calculation done for $A = -1, B = 0.55, E = 0$ and $J_z = 0$ or 5% of the maximal spin J_{\max} .

system's rotation by the fraction of the actual angular momentum J_z to the maximal angular momentum J_{\max} that the system with a given energy can support:

$$j \equiv \frac{J_z}{J_{\max}}. \quad (28)$$

The value of J_{\max} depends on energy and on the model control parameters. In Fig. 10 we show two sections of this dependence. Note that in this subsection we will utilize the variable- B parametrization (ii) with $A = -1$ (Subsec. II B). The B -dependence of J_{\max} , in Fig. 10(a) displayed for $E = 0$ (the energy value analyzed below), increases steeply which means that a constant value of the relative angular momentum j yields an increasing absolute value J_z . On the other hand, the energy dependence shown in Fig. 10(b) is well approximated by the known yrast-band relation $E - E_{\min} \propto J_{\max}^2$, where E_{\min} is the minimal potential energy for a given B .

We already know that Poincaré sections in case of non-zero angular momentum cannot be represented by planar images. Therefore, it is no longer feasible to utilize the 2D regular fraction f_{reg} defined by Eq. (27) and we have to find an alternative measure of regularity. A natural generalization of the quantity f_{reg} is represented by the relative fraction F_{reg} of the phase-space *volume* [13], i.e., the volume V_{reg} associated with regular orbits (e.g., in the sense of initial conditions) divided by the whole phase space volume V_{tot} accessible at given values of energy and control parameters. From the numerical viewpoint, the above fraction can be approximated by a ratio of the number of regular trajectories in a given sample, N_{reg} , to the number N_{tot} of all trajectories generated:

$$F_{\text{reg}} \equiv \frac{V_{\text{reg}}}{V_{\text{tot}}} \approx \frac{N_{\text{reg}}}{N_{\text{tot}}}. \quad (29)$$

With an increasing size of the numerical sample of trajectories (with randomly selected initial conditions covering the whole available phase space) the precision of F_{reg} determination gradually improves. In our simulations, we had $N_{\text{tot}} \approx 200$. The resulting statistical error of F_{reg} is negligible, about 1%, while possible numerical error was estimated up to ≈ 10 –20%.

Although the fraction (29) is not identical with that from Eq. (27), a reasonable correspondence of both mea-

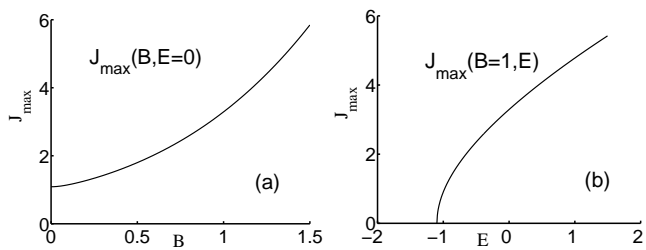


FIG. 10: Two sections of the dependence of maximal angular momentum J_{\max} on control parameter B (panel a) and energy E (panel b).

tures is expected for $\mathbf{J} = 0$. This comparison for $E = 0$, in the parametrization with variable B and $A = -1$, is plotted in Fig. 11. The dependence of f_{reg} was taken from Ref. [15] and can be also compared to the $A < 0$ part of the $E = 0$ curve in Fig. 4 using the scaling relation $A = -\frac{1}{B^2}$. Admittedly, there are a few discrepancies between the two dependences in Fig. 11, the most notable ones at $B = 0.3$ and at the following extrema, but as a whole, the two graphs do match reasonably well. Let us stress that the f_{reg} and F_{reg} measures are different by definition and a complete accordance should not be expected.

To evaluate Eq. (29), regular trajectories have to be distinguished from the chaotic ones. This has been ac-

complished via generating pairs of trajectories with very close initial conditions (instead of single trajectories) and by analyzing the time dependence of their logarithmic deviations, see Ref. [13]. A *chaotic* trajectory separates from the neighbors exponentially, as follows from the very definition of chaos. When this trend is checked by the finiteness of the phase space, the deviation gently fluctuates around its saturated value. For this reason, the logarithm of the separation as a function of time tends to be approximately a two-piece linear function with its second part constant. As the separation of the *regular* trajectory from its neighbors is polynomial, the saturation is rarely attained, and the time dependence of logarithm of separation is logarithmic. So the distinction between a regular and a chaotic trajectory is straightforward, provided that the time scale is chosen adequately. Let us note that there exist alternative methods for computing Lyapunov exponents (e.g., the one based on repeated rescaling of the distance of neighboring trajectories [28] which avoids the saturation due to the finiteness of the phase space), but for our purposes the present approach was found quite suitable.

Figure 12 shows the dependence of the regular fraction F_{reg} on parameter B for $E = 0$ and several values of relative angular momentum (28). First, we have checked (the result not being shown here) that the dependence $F_{\text{reg}}(B)$ for $j < 0.01$ is very similar to that for $j = 0$. For greater values of spin, $j \geq 0.05$, the $B > 0.3$ extrema in Fig. 12 shift rightwards and/or eventually vanish. This is accompanied by the emergence of a saturation region with $F_{\text{reg}} \approx 1$ at $j \approx 0.1$ that moves toward smaller B s with increasing spin. Note, however, that the location of the first deep minimum of regularity in the range $0.1 < B < 0.3$ slowly moves leftwards and its depth increases with j . It follows that introduction of sufficient angular momentum tends to stabilize the system for $B > 0.3$, in agreement with the same average trend observed in the IBM [13]. For $B < 0.3$, on the other hand, the degree of chaos slightly increases with j . Smaller values of angular momentum have little influence on the system's regularity.

IV. SUMMARY AND CONCLUSIONS

We have analyzed classical chaos in the geometric collective model describing in the simplest approximation vibrations and rotations of nuclei with quadrupole deformations. The reason for investigating the classical version of the model—despite the quantum nature of nuclei—follows from the need to understand the classical character of various types of motions that emerge in different regimes of nuclear collective dynamics, in particular those involved in the competition between regular and chaotic features.

In the analytic part (Sec. II), we describe the properties specific for the classical treatment of the collective model. From the topics discussed therein we high-

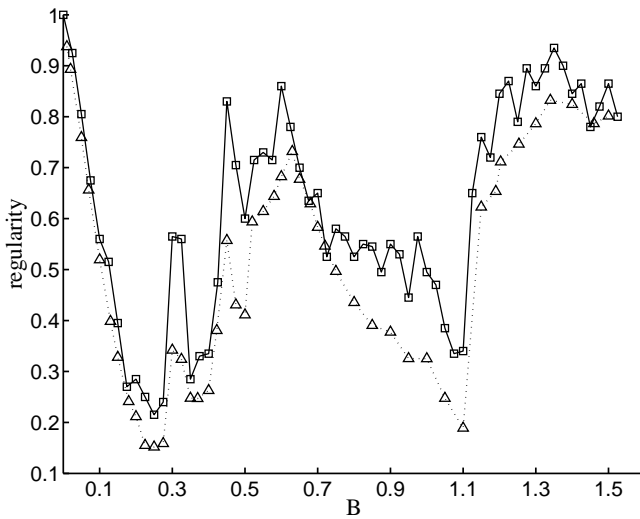


FIG. 11: Comparison of f_{reg} (dotted) and F_{reg} (full line) from Eqs. (27) and (29), respectively, for $\mathbf{J} = 0$, $E = 0$ and $A = -1$.

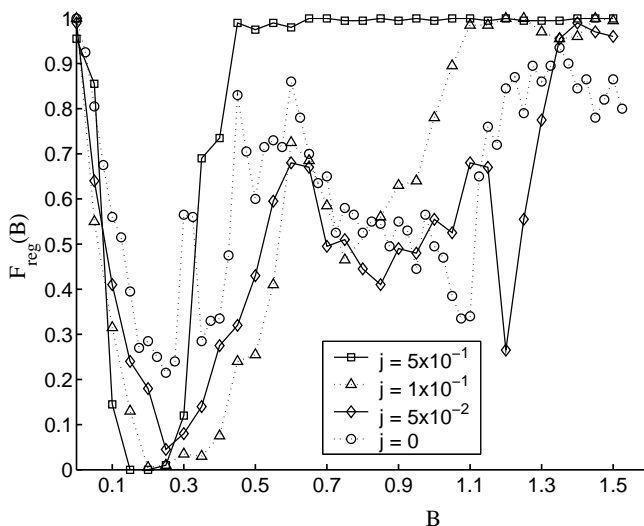


FIG. 12: Dependence of the regular fraction F_{reg} from Eq. (29) on parameter B for $A = -1$, $E = 0$, and various values of the relative angular momentum j .

light particularly the scaling properties (Subsecs. IIB and IIC) which ensure that in the truncated form the *classical* GCM has just one essential external parameter (e.g., A or B) and that there exist two independent paths crossing all non-equivalent dynamical configurations. In the parametrizations with variable A and B , respectively, these two paths can be expressed as follows: (i) $A \in (-\infty, +\infty)$ with $B = \pm 1$ or $B = 0$, and (ii) $B \in [0, \pm\infty)$ with $A = -1$ or $A = +1$ (the sign of B is arbitrary since the symmetric prolate and oblate configurations are related just by a trivial transformation). Note that both paths (in each parametrization) join for $A \rightarrow \pm\infty$ and $B \rightarrow \pm\infty$.

We have also analyzed (Subsecs. IID and IIE) expressions for the classical angular momentum and showed that in the simplest rotating case, when the spin is parallel with one of the principal axes of the quadrupole deformation (Subsec. IIF), the configuration space is only 3-dimensional and can be naturally represented by coordinates (15). The resulting equations of motions (Subsec. IIE) are equivalent with those describing a particle moving in potential V and subject to centrifugal forces associated with a conserved value of angular momentum J_z .

In the numerical part (Sec. III) we have demonstrated that the GCM exhibits an unexpectedly complex interplay between regular and chaotic types of motions. This is in agreement with our earlier result [15], but in the present paper we extended the previous analysis (i) by evaluating the $\mathbf{J} = 0$ planar regular fraction (27) at several energies for the whole parameter path across the spherical-deformed shape phase transition (see Subsec. IIIA), and (ii) by analyzing the dependence of the volume regular fraction (29) and Lyapunov exponents on the angular momentum J_z at $E = 0$ for the parameter range covering the deformed side of the phase diagram (Subsec. IIIB).

The most important result obtained in the $\mathbf{J} = 0$ part (Subsec. IIIA) is the discovery of the two quasiregular islands in intermediate domains of the control parameter A and energy E . One of these islands resides at low energies, $E < 1$, in the range approximately $A \in [-6, -1]$, $B = 1$, see Fig. 4 (equivalent to $B \in [0.4, 1]$, $A = -1$, see Fig. 11), and the other one at intermediate energies, $20 < E < 30$, within the interval $A \in [-1, +1]$, i.e., around the spherical-deformed transition, see Fig. 5. While the latter quasiregular region is probably too high in excitation energy to be relevant experimentally, the former one is undoubtedly a close relative of the IBM “arc of regularity” [13] which was recently shown to have a potential impact on nuclear data [18]. It needs to be stressed that the origin of regularity in the above do-

main still remains rather unclear. On the other hand, the mechanism underlying the emergence of chaos in nuclear collective motions at the lowest energies was identified with the convex–concave transition of the shape of the kinematically accessible area in the plane of deformation parameters (Fig. 6), similar to billiard systems. This conclusion might be important from the viewpoint of practical low-energy nuclear-structure physics.

In the $J_z > 0$ part (Subsec. IIIB) we showed that within the classical GCM the effect of spin can never be treated in a perturbative way. This is so because of the no-crossing rule valid for the quadrupole tensor eigenvalues in the rotating case (Subsec. IIF), which implies that classical orbits with non-zero (anyhow small) spin are likely to eventually start diverging from the zero-spin orbits with the same initial deformation (see Fig. 9). The dependence of the degree of chaos on angular momentum, as shown in Fig. 12, is non-monotonous and depends on the value of control parameter. Nevertheless, we can roughly outline these results as indicating the overall tendency for suppression or enhancement of chaos with increasing angular momentum for $B > 0.3$ or $B < 0.3$, respectively. It seems that sufficiently large centrifugal forces may totally regularize as well as totally chaoticize vibrations of the nuclear droplet, depending on values of the model control parameters. We have to stress, however, that the $\mathbf{J} \neq 0$ study was performed here only in a limited parameter and energy range, and under certain simplifying assumptions (see Subsec. IID).

We believe that the investigation of regular and chaotic collective motions of nuclei and similar objects (atomic clusters etc.) constitute a perspective topic for future studies. One of the indisputably nice aspects of this field (besides the importance for nuclear-structure physics) is the conceptual simplicity combined with surprising complexity of results, which makes it an attractive subject for student work (note that a considerable part of this paper is based on master theses of the first two authors). A continuously updated database of results on the classical GCM and IBM dynamics (including animations) can be found on our web pages [29].

Acknowledgments

The authors would like to thank Z. Pluhař and M. Macek for useful discussions. This work was supported by Grant Agency of the Czech Republic (Project 202/06/0363) and by Czech Ministry of Education (Project MSM 0021620834).

[1] M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1990).

[2] H.-J. Stöckmann, *Quantum Chaos. An Introduction*

(Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1999).

[3] *Statistical Theories of Spectra: Fluctuations*, ed. C.E. Porter (Academic Press, New York, 1965); T.A. Brody,

- J. Flores, J.B. French, P.A. Mello, A. Pandey, S.S.M. Wong, *Rev. Mod. Phys.* **53**, 385 (1981).
- [4] A.Y. Abul-Magd, H.A. Weidenmüller, *Phys. Lett.* **162B**, 223 (1985); T. von Egidy, A.N. Behkami, H.H. Schmidt, *Nucl. Phys.* **A454**, 109 (1986); T. von Egidy, H.H. Schmidt, A.N. Behkami, *Nucl. Phys.* **A481**, 189 (1988).
- [5] O. Bohigas, P. Leboeuf, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 092502 (2002); S. Åberg, *Nature* **417**, 499 (2002); J.G. Hirsch, V. Velázquez, A. Frank, *Phys. Lett. B* **595**, 231 (2004); J.G. Hirsch, A. Frank, V. Velázquez, *Phys. Rev. C* **69**, 037304 (2004); J. Barea, A. Frank, J.G. Hirsch, P. Van Isacker, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 102501 (2005).
- [6] R. Arvieu, F. Brut, J. Carbonell, J. Touchard, *Phys. Rev. A* **35**, 2389 (1987).
- [7] P. Rozmej, R. Arvieu, *Nucl. Phys.* **A545**, C497 (1992).
- [8] W.D. Heiss, R.G. Nazmitdinov, S. Radu, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2351 (1994); *Phys. Rev. C* **52**, 3032 (1995); W.D. Heiss, R.G. Nazmitdinov, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1235 (1994).
- [9] A. Bohr, B. Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol. II (Benjamin, Reading, Mass, 1975).
- [10] F. Iachello, A. Arima, *The Interacting Boson Model* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1987).
- [11] G. Gneuss, U. Mosel, W. Greiner, *Phys. Lett.* **30B**, 397 (1969); **31B**, 269 (1970); G. Gneuss, W. Greiner, *Nucl. Phys.* **A171**, 449 (1971).
- [12] J.M. Eisenberg, W. Greiner, *Nuclear Theory*, Vol. 1, *Nuclear Models* (North-Holland, Amsterdam, 1987).
- [13] Y. Alhassid, A. Novoselsky, N. Whelan, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2971 (1990); Y. Alhassid, N. Whelan, *Phys. Rev. C* **43**, 2637 (1991); *Phys. Rev. Lett.* **67**, 816 (1991); Y. Alhassid, A. Novoselsky, *Phys. Rev. C* **45**, 1677 (1992); Y. Alhassid, D. Vretenar, *Phys. Rev. C* **46**, 1334 (1992); N. Whelan, Y. Alhassid, *Nucl. Phys.* **A556**, 42 (1993).
- [14] V. Paar, D. Vorkapić, *Phys. Lett. B* **205**, 7 (1988); *Phys. Rev. C* **41**, 2397 (1990); V. Paar, D. Vorkapić, A.E.L. Dieperink, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2184 (1992).
- [15] P. Cejnar, P. Stránský, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 102502 (2004).
- [16] According to Empedocle, the real world (*Cosmos*) is a mixture of *Sphairos*, the exquisite world of perfect order, and *Chaos*, the world of complete disorder.
- [17] P. Cejnar, J. Jolie, *Phys. Lett. B* **420**, 241 (1998); *Phys. Rev. E* **58**, 387 (1998).
- [18] J. Jolie, R.F. Casten, P. Cejnar, S. Heinze, E.A. McCutchan, N.V. Zamfir, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 132501 (2004).
- [19] M. Hénon, C. Heiles, *Astron. J.* **69**, 73 (1964).
- [20] C.C. Noack, *Nucl. Phys. A* **108**, 493 (1968).
- [21] K. Fujikawa, H. Ui, *Prog. Theor. Phys.* **75**, 997 (1986).
- [22] Jing ye Zhang, R.F. Casten, and N.V. Zamfir, *Phys. Lett. B* **407**, 201 (1997).
- [23] M.A. Caprio, *Phys. Rev. C* **68**, 054303 (2003).
- [24] P. Cejnar, S. Heinze, and J. Jolie, *Phys. Rev. C* **68**, 034326 (2003).
- [25] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Part 1, Course of Theoretical Physics, Vol. V (Butterworth-Heinemann, Oxford, 2001).
- [26] M. Macek, P. Cejnar, P. Stránský, S. Heinze, J. Jolie, J. Dobeš, to be published.
- [27] F. Iachello, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 052502 (2001).
- [28] H.J. Korsch, H.-J. Jodl, *Chaos. A Program Collection for the PC* (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [29] <http://www-ucjf.troja.mff.cuni.cz/~geometric/>.

Příloha III

Order and chaos in the geometric collective model

Přetisk článku [Str07] publikovaného v časopise *Physics of Atomic Nuclei* **70**, sv. 9, 1572 (2007).

Order and chaos in the geometric collective model

Pavel Stránský, Pavel Cejnar, Michal Macek

Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, V Holešovičkách 2, 180 00 Prague, Czech Rep.

We investigate collective vibrations and rotations of atomic nuclei from the classical viewpoint within the geometric collective model. We quantify the proportion of regular and chaotic orbits in the phase space, observing very complex behavior of its dependence on the model control parameters, energy, and angular momentum.

PACS numbers: 21.60.Ev, 05.45.Pq

I. INTRODUCTION

In recent years, quadrupole collective motions of nuclei have been shown to represent an excellent example of dynamics on the border between order and chaos [1–3] and became interesting not only for nuclear physicists but also for those interested in general questions of complexity and nonlinear phenomena. We use the geometric collective model (GCM) in its classical case, studying proportion of regular and chaotic modes of motion in dependence on different values of external parameters, on angular momentum and energy. In spite of apparent simplicity of GCM approximations, surprising variability and complexity of the existing types of collective modes was disclosed. The quantity of regularity shows sharp peaks surrounded by the sea of chaos.

In this article we considerably simplify the situation in the GCM using scaling properties of Lagrangian that allows us to reduce the number of external parameters. Then we show main aspects of measuring chaos and analyse the degree of chaos for the cases corresponding to axially deformed shapes as a function of the essential free parameters B and κ , of energy E and angular momentum J . The primary focus of our work is to investigate the dominant features of the GCM dynamics in all regimes, and so we occasionally fall into unrealistic ones.

II. THE MODEL

We deal with the truncated Lagrangian of quadrupole shape deformations $L = T - V$. The potential and kinetic terms read as

$$V = A \underbrace{\sqrt{5} [\alpha \times \alpha]^{(0)}}_{\nu_A} - B \underbrace{\sqrt{\frac{35}{2}} [[\alpha \times \alpha]^{(2)} \times \alpha]^{(0)}}_{\nu_B} + C \underbrace{5 \left([\alpha \times \alpha]^{(0)} \right)^2}_{\nu_C} \quad (1)$$

$$T = \frac{K}{2} \left(1 + \kappa \sqrt{5} [\alpha \times \alpha]^{(0)} \right) \underbrace{\sqrt{5} [\dot{\alpha} \times \dot{\alpha}]^{(0)}}_{\tau}, \quad (2)$$

where α_μ are quadrupole collective variables forming a spherical tensor of rank $\lambda = 2$ (with $\mu = -2, \dots, 2$)

and describing the dynamics of deformations (only 5 real components of this 5 complex variables are independent because of the relation $\alpha_{-\mu}^* = (-1)^\mu \alpha_\mu$, so the system has 5 degrees of freedom). $\{A, B, C, K, \kappa\}$ denote a set of external parameters, $[\bullet \times \bullet]^{(\lambda)}$ stands for the coupling to angular momentum λ and the dot for time derivative. We have defined for further reference shorthand notations $\mathcal{V}_{A,B,C}$ and \mathcal{T} .

The condition $C > 0$ ensures that the system is bound ($\|\alpha\| < \infty$) and has a finite ground-state energy. Since we do not want to insist on smallness of α , we may assume that the coefficients at higher order terms in the expansions of V and T become negligible.

In Lagrangian (1)–(2) there are quantities of three fundamental physical units: unit of size, of energy and of time (represented by α , L and the time derivative d/dt). Consider the transformation

$$\alpha = a \bar{\alpha}, \quad L = b \bar{L}, \quad t = c \bar{t}, \quad (3)$$

where $\bar{\alpha}$, \bar{L} , and \bar{t} are quantities in new units, fixed by constants a , b , and c . Defining

$$\bar{A} = \frac{a^2}{b} A, \quad \bar{B} = \frac{a^3}{b} B, \quad \bar{C} = \frac{a^4}{b} C, \\ \bar{K} = \frac{a^2}{bc^2} K, \quad \bar{\kappa} = a^2 \kappa \quad (4)$$

(we assume that none of these expressions is singular), one obtains a transformed Lagrangian \bar{L} of the same form as above,

$$\bar{L} = \frac{\bar{K}}{2} (1 + \bar{\kappa} \bar{\mathcal{V}}_A) \bar{\mathcal{T}} - \bar{A} \bar{\mathcal{V}}_A - \bar{B} \bar{\mathcal{V}}_B - \bar{C} \bar{\mathcal{V}}_C, \quad (5)$$

where expressions for $\bar{\mathcal{T}}$ and $\bar{\mathcal{V}}_{A,B,C}$ have the same form as those from (1)–(2), but with substitutions from (α, t) to $(\bar{\alpha}, \bar{t})$. Without the loss of generality, the units can therefore be chosen such that three out of the five parameters $\{A, B, C, K, \kappa\}$ become equal to unity and the remaining two parameters take the role of the only external variables.

Since the scaling does not change physical content, the above construction shows that the classical GCM has just *two* essential control parameters (and *one* if even more truncated kinetic term with $\kappa = 0$ is considered). This feature simplifies the classification of all possible qualitative configuration of the system. In the next we will

	B	f_{reg}	$\left(\frac{B}{B_a}\right)^2$
a	0.313	0.40	1
b	0.446	0.65	2.03
c	0.535	0.63	2.92
d	0.625	0.75	3.99

TABLE I: Maxima of $f_{\text{reg}}(B)$ for the simple GCM with $\mathbf{J} = 0$, $E = 0$. In the last column they are compared with B_a (the B value of the first maximum).

use the parametrization with $|\bar{A}| = 1, \bar{C} = \bar{K} = 1$ and variable \bar{B} , because this parameter controls the onset of chaoticity, as we show later. On the other hand, the parametrization with variable \bar{A} is advantageous if one wants to follow the transition from deformed to spherical equilibrium shapes, as discussed in Ref. [3]. The second of the two control parameters will always be $\bar{\kappa}$. For the sake of brevity, the bar above the transformed quantities will be skipped. Note that the combination $\frac{AC}{B^2}$ is invariant for all parameterizations, see Eq. (II).

In order to extend more our tools that can be used to analyse dynamical properties of the GCM we introduce angular momentum through expression [4]

$$J_\mu = iK\sqrt{10} [\alpha \times \dot{\alpha}]_\mu^{(1)}, \quad \mu = -1, \dots, 1 \quad (6)$$

(as the spherical tensor of rank $\lambda = 1$). The 5 degrees of freedom of Lagrangian L can be separated into three rotational and two vibrational by transforming the system into the intrinsic frame. If we require

$$\alpha_{-2} = \alpha_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\xi, \quad \alpha_{-1} = \alpha_1 = 0, \quad \alpha_0 \equiv \eta$$

$$\dot{\alpha}_{-2} = \dot{\alpha}_2, \quad \dot{\alpha}_{-1} = \dot{\alpha}_1 = 0, \quad (7)$$

where ξ and η describes pure deformations of nuclear shape, we obtain the non-rotating case of zero angular momentum and very simple 2D Lagrangian

$$L_{J=0} = \frac{K}{2} (1 + \kappa (\eta^2 + \xi^2)) (\dot{\eta}^2 + \dot{\xi}^2) - A(\eta^2 + \xi^2) - B\eta (3\xi^2 - \eta^2) - C(\eta^2 + \xi^2)^2 \quad (8)$$

(in Bohr coordinates $\eta = \beta \cos \gamma$, $\xi = \beta \sin \gamma$ the potential has the well-known form $V = A\beta^2 + B\beta^3 \cos 3\gamma + C\beta^4$).

At this point we are ready to construct Langrange equations of motion for two different cases $J = 0$, $J \neq 0$ and to investigate its solutions.

III. TWO MEASURES OF CHAOS

In this section we introduce two different methods to quantify the proportion between regular and chaotic solutions of GCM.

The first method is suitable only for systems with 2 degrees of freedom. The phase space of such a system is effectively 4-dimensional (4D) which means that trajectories with fixed values of energy lie on 3D manifolds. As the classical trajectories do not cross each other, each point of the 2D Poincaré section [5] of the phase space is passed just by one trajectory. Regular trajectories form sets of 1-dimensional curves (ovals) (periodic orbits create just sequences of isolated points on these curves), whereas chaotic trajectories uniformly cover a fraction of the section area. This is demonstrated in Fig. 1. For systems with more degrees of freedom the uniqueness of the Poincaré mapping of trajectories gets lost.

We will quantify the degree of regularity in case of 2D system (non-rotating GCM) by a relative fraction of regular islands in the Poincaré section [3]:

$$f_{\text{reg}} = \frac{S_{\text{reg}}}{S_{\text{tot}}}, \quad (9)$$

where S_{reg} is the area corresponding to all regular islands in the $\xi = 0$ Poincaré section and S_{tot} is the total kinematically accessible area (regular and ergodic) of the same section. Fraction (9) may change between limiting values 0 (complete chaos) and 1 (perfect order).

The second method how to quantify regularity of the dynamical system, which works both for 2D and for more-D systems, can we introduce as follows. We generate trajectories with randomly chosen initial conditions and then separate them into two sets: regular and chaotic. The regular fraction could then be defined as

$$F_{\text{reg}} = \frac{N_{\text{reg}}}{N_{\text{tot}}}, \quad (10)$$

where N_{reg} is the number of regular trajectories of total N_{tot} trajectories. If the initial conditions of the randomly chosen trajectories uniformly cover the accessible manifold of the phase space and if the Poincaré section is selected such that every trajectory crosses it, then the definitions (9) and (10) give for large N_{tot} same results. We will assume that this condition is fulfilled and use only one notation f_{reg} . To distinguish between regular and chaotic trajectories we use the new fast method SALI (Smaller ALignment Index) [6].

IV. NUMERICAL RESULTS

At first we will analyze the degree of regularity of the motions generated by Lagrangian (II) for zero angular momentum and for $\kappa = 0$. The parametrization with variable B and with $A = -1, C = K = 1$ will be used (negative A describes axially deformed shapes).

The basic result—the dependence of fraction f_{reg} on the parameter B —is plotted in Fig. 2(a), and the dependence of f_{reg} on E for several values B is shown in Fig. 3. While the behavior observed in asymptotic regimes $B = 0$, $B \rightarrow \infty$ (Fig. 2(a)) and at $E \approx E_{\text{min}}$,

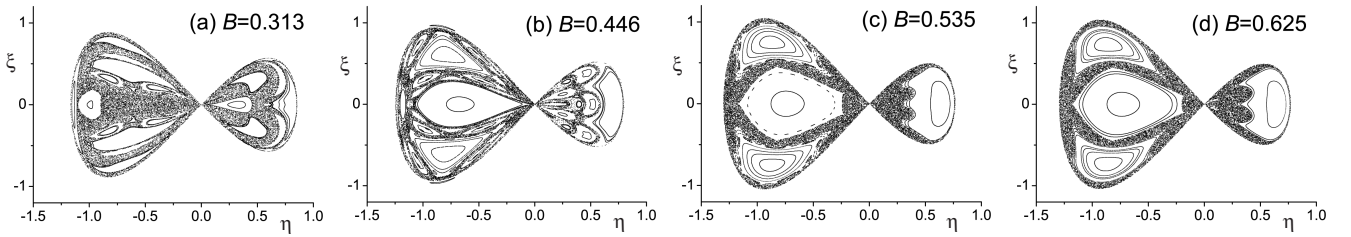


FIG. 1: Poincaré sections with 52 randomly chosen trajectories at $\kappa = 0$, $E = 0$, $J = 0$ for various B values. More complex structure of sections appears for smaller B .

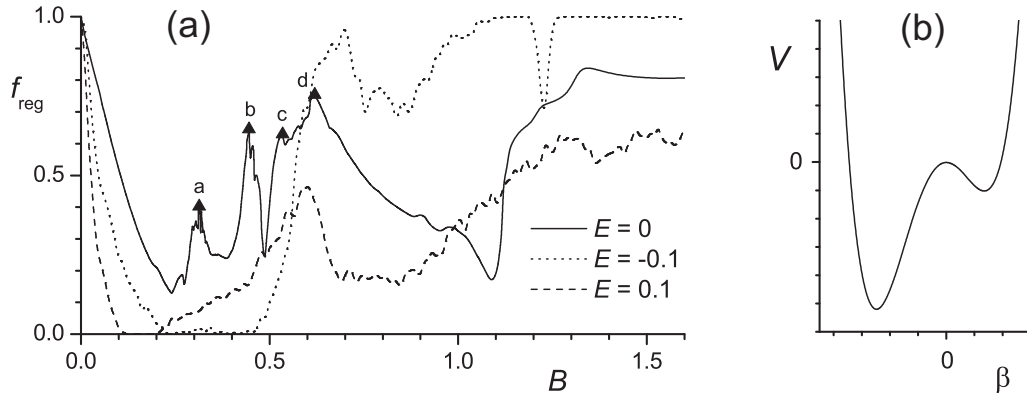


FIG. 2: (a) The regular fraction of the phase space as a function of B for $\kappa = 0$, $J = 0$ and absolute energy $E = 0, 0.1$. Four sharp maxima at $B = 0.313, 0.446, 0.535, 0.625$ (see also Tab. II) are marked with letters a, b, c, d respectively. Poincaré sections belonging to the maxima are drawn in Fig. 1. (b) Example of potential for $A < 0, B, C, K > 0$ (axially deformed shape), $\kappa = 0$ and $\gamma = 0$.

$E \rightarrow \infty$ (Fig. 3) can be understood from simple general arguments, discussed below, the temporal increase of regularity in the intermediate domains of both A and E represents a rather unexpected feature of the system.

Let us discuss the curve for $E = 0$ in Fig. 2(a). For $B = 0$ the system is integrable (quartic oscillator) and thus fully regular. With increasing B the f_{reg} decrease, but it does not reach zero. Surprisingly it begins to rise and shows 4 sharp maxima with high regularity (Tab. II) at values labeled B_x , $x = a, b, c, d$. The squares of ratios B_x/B_a are natural numbers with good precision. This feature can be connected with some kind of unknown symmetry in the system. The last maximum at B_d is probably related to an analogous suppression of chaos detected within the “regular arc” in the interacting boson model (IBM) [1]. It can be deduced from similarities of the GCM and IBM Poincaré sections in the respective parameter domains [7]. Leaving the maxima and moving towards higher values of B , there appears a deep minimum at $B = 1.09$ and then the f_{reg} begins to rise and reaches 1 for $B \rightarrow \infty$ (due to the scaling properties, this asymptotic case is equivalent to $A = 0, B = C = K = 1$).

Appropriate Poincaré sections for the maxima of regu-

larity (Tab. II) are plotted in Fig. 1. The most complex picture with many regular islands—remnants of tori—occurs for $B = 0.446$, whereas for larger B the pictures become simpler. It is related with rich dependence of $f_{\text{reg}}(B)$ in the intermediate range of B .

The energy $E = 0$ plays special role. It is given by the shape of the potential (Fig. 2(b)), having the local maxima at $\beta = 0$, $E = 0$. Looking at the curves for $E = \pm 0.1$ in Fig. 2(a) we see that the structure in the intermediate region of parameter B disappears. Also the fading of regularity for small B is much faster. Nevertheless the maximum connected with the “regular arc” in the IBM near $B \approx 0.6$ persists.

The energetical dependence of the f_{reg} , as illustrated in Fig. 3, is very similar to the dependence on B . At *very small* energies, small-amplitude motions around the global minimum of the potential are regular due to validity of a local 2D harmonic-oscillator approximation. As the energy rises, f_{reg} remains equal to 1 until a certain point—afterwards it drops sharply. This value can be approximately predicted from the form of the potential. The border of the kinematically accessible area in the $\xi \times \eta$ plane is fully convex below this value of energy and

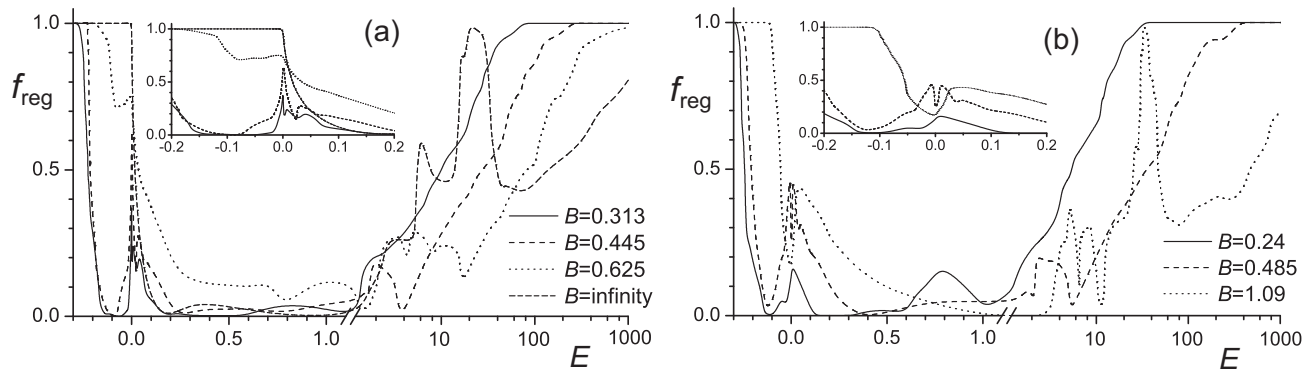


FIG. 3: The regular fraction as a function of energy for $\kappa = 0$. The values of B correspond to (a) maxima and (b) minima of the curve for $E = 0$ from Fig. 2(a). The horizontal axis is split into linear and logarithmic parts. The insets expand the $E \sim 0$ region.

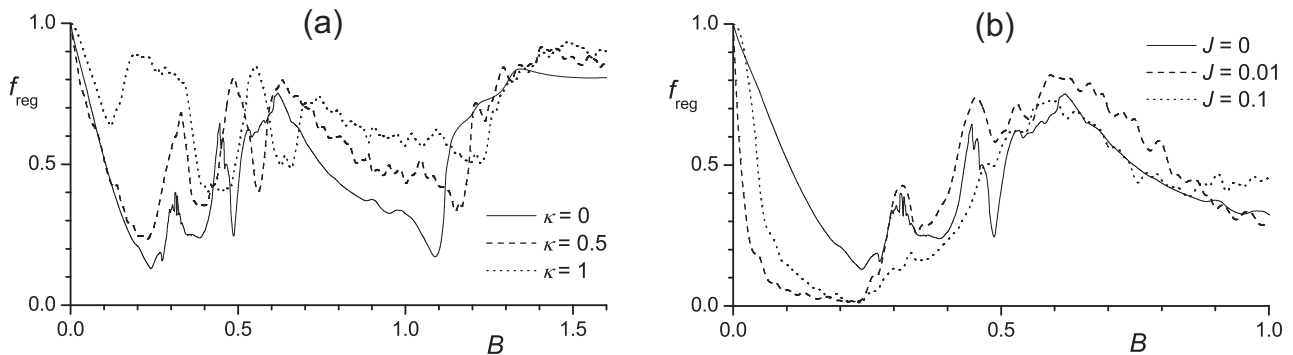


FIG. 4: (a) The regular fraction as a function of B for $\kappa \neq 0$, $J = 0$ and absolute energy $E = 0$. (b) The same as in panel (a), but for $\kappa = 0$ and nonzero angular momentum J . For comparison, there is also shown the solid curve from Fig. 2(a) on both panels.

becomes partly concave above. For *very large* energies the value of f_{reg} tends logarithmically to 1, which can be explained by the fact that the system is more and more affected by the γ -independent quartic term of potential. In the intermediate domain, between the low- and high-energy limits, the regular fraction exhibits a complicated energy dependences, especially near zero energy (this behavior is illustrated in insets of Fig. 3), and for $B > 0.9$ also in the region $20 < E < 30$, where one peak of full regularity appears (see curves for $B = \infty$ in Fig. 3(a) and for $B = 1.09$ in Fig. 3(b)). Whereas in the scaling with parameter B the position of this peak moves with changing B , in the scaling with A it has fixed value $E \approx 23$ Ref. [3].

Extending the GCM by setting $\kappa \neq 0$ (i.e. by introducing more complicated kinetic term), the dependence $f_{\text{reg}}(B)$ for $E = 0$ do not change markedly, as it is depicted in Fig. 4(a). For $\kappa = 1$ the first maximum of regularity appears for smaller B , and other maxima are

slightly shifted towards greater B . The overall regularity rises with increasing κ .

Returning back to $\kappa = 0$ we demonstrate the influence of non-zero angular momentum in Fig. 4(b). Two main differences between rotating and non-rotating case are: (1) the abrupt increase of chaos for small B and (2) the suppression of complex structure containing minima and maxima in the intermediate range of parameter B . The maximum of regularity at $B \approx 0.6$, however, still remains.

V. SUMMARY

We have analyzed classical chaos in the GCM and observe complex behavior of regularity in dependence on two external control parameters B and κ (which are the only two control parameters due to scaling properties), on energy and on angular momentum. The character

of the system's dynamics is predictable for very low and very high values of B or energies. On the other hand very little is known about the nature of the temporal increase of regularity in the intermediate range of approximately $0.2 < B < 1.2$. Nevertheless even if the structure of maxima and minima changes with angular momentum, energy or parameter κ , the maximum near $B \approx 0.6$ remains. It indicates that the origin of it is highly universal. This maximum is undoubtedly a close relative of the IBM "regular arc"[7]. We also discover that the maxima of regularity for the case of $\kappa = 0$, zero angular momentum and zero energy forms the array with very simple ratio of its elements.

We show that increasing κ (i.e. introducing new term which is physically connected with the coordinate-dependent mass) does not rapidly change the dependence of regularity on parameter B , only the extremes shift. On the other hand nonzero angular momentum changes the situation more widely. Centrifugal forces totally chaoticize the system for small B and smooth the complex structure

for larger B . Theoretically the effect of non-zero spin in the GCM is elaborated in [3].

We have demonstrated that the investigation of regular and chaotic collective motions of nuclei (even those with $J = 0$) represents one of the most striking examples of dynamics between order and chaos and constitute a perspective topic for future studies. A continuously updated database of results on the classical GCM and IBM dynamics can be found on our web pages [8].

Acknowledgments

The authors would like to thank F. Iachello for fruitful and suggestive discussions. This work was supported by Grant Agency of the Czech Republic (Project 202/06/0363) and to Czech Ministry of Education (Project MSM 0021620834).

-
- [1] Y. Alhassid, A. Novoselsky, N. Whelan, Phys. Rev. Lett. **65**, 2971 (1990); Y. Alhassid, N. Whelan, Phys. Rev. C **43**, 2637 (1991); Phys. Rev. Lett. **67**, 816 (1991); Y. Alhassid, A. Novoselsky, Phys. Rev. C **45**, 1677 (1992); Y. Alhassid, D. Vretenar, Phys. Rev. C **46**, 1334 (1992); N. Whelan, Y. Alhassid, Nucl. Phys. **A556**, 42 (1993).
- [2] V. Paar, D. Vorkapić, Phys. Lett. B **205**, 7 (1988); Phys. Rev. C **41**, 2397 (1990); V. Paar, D. Vorkapić, A.E.L. Dieperink, Phys. Rev. Lett. **69**, 2184 (1992).
- [3] P. Cejnar, P. Stránský, Phys. Rev. Lett. **93**, 102502 (2004); P. Stránský, M. Kurian, P. Cejnar, Phys. Rev. C **74**, 014306 (2006)
- [4] J.M. Eisenberg, W. Greiner, *Nuclear Theory*, Vol. 1, *Nuclear Models* (North-Holland, Amsterdam, 1987).
- [5] M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1990).
- [6] Ch. Skokos, J. Phys. A: Math. Gen **34** (2001), 10029; Ch. Skokos, Ch. Antonopoulos, T.C. Bountis, M.N. Vrahatis, J. Phys. A: Math. Gen **37** (2004), 6269
- [7] M. Macek, P. Cejnar, P. Stránský, S. Heinze, J. Jolie, J. Dobeš, submitted to Phys. Rev. C
- [8] <http://www-ucjf.troja.mff.cuni.cz/~geometric/>.

Příloha IV

Quantum chaos in the nuclear collective model: Classical-quantum correspondence

Přetisk článku [Str09a] publikovaného v časopise *Physical Review E* **79**, 046202 (2009).

Quantum chaos in the nuclear collective model: Classical-quantum correspondence

Pavel Stránský, Petr Hruška, Pavel Cejnar

*Institute of Particle and Nuclear Physics, Faculty of Mathematics and Physics,
Charles University, V Holešovičkách 2, 180 00 Prague, Czech Republic*

Spectra of the geometric collective model of atomic nuclei are analyzed to identify chaotic correlations among nonrotational states. The model has been previously shown to exhibit a high degree of variability of regular and chaotic classical features with energy and control parameters. Corresponding signatures are now verified also on the quantum level for different schemes of quantization and with a variable classicality constant.

PACS numbers: 05.45.Mt, 24.60.Lz, 21.60.Ev

I. INTRODUCTION

What are typical features of a quantum system whose classical limit is chaotic? This is a central question of so-called “quantum chaos” [1–5], a branch of quantum physics that has been attracting a considerable interest since 1970’s. Apparently, quantum systems show no trajectories, hence no Lyapunov exponents, Poincaré sections or other signatures constitutional for the distinction of chaos on the classical level. Instead, some genuinely quantum attributes of the system seem to absorb the information on the regular or chaotic character of the classical dynamics. The best known examples are correlation properties of the spectra of energy levels. As a surprise, quantum systems with a chaotic classical counterpart show highly correlated quantum spectra, described within the theory of Gaussian matrix ensembles [6], while the spectra of systems that are classically regular look more or less random.

In recent years, alternative signatures of quantum chaos have been proposed, like the morphology of wave functions [1, 2, 5], fluctuations of the scattering matrix [5], sensitivity to perturbations [7] etc. The research of these issues is by far not completed. Note that the absence of an exact definition of chaos on the quantum level led to a proposal to use the term “quantum chaology” instead of quantum chaos [8].

The relation of spectral properties of chaotic quantum systems to those of Gaussian matrices was proposed by Bohigas, Giannoni, and Schmit in 1984 [9]. Since then, the conjecture has been tested in numerous concrete systems and supported by several involved theoretical analyses. Recently, correlation properties of quantal spectra were rephrased into the language of stochastic time series with $\sim 1/f^\alpha$ type of noise, the chaotic case being identified with $\alpha = 1$ [10].

In spite of this progress, some problems concerning the relation of the level statistics to classical chaos remain open. The following two questions, in particular, helped to guide the work presented in this article: First, if the classical dynamics exhibits abrupt transitions between dominantly regular and dominantly chaotic types of motions with varying energy, to what extent does the level statistics within a single spectrum follow these changes?

Second, since the quantization is not a unique procedure, does Bohigas’ conjecture hold in all quantum realizations of the given classical system?

The model we use to probe the above questions is the geometric model of nuclear collective motions [11]. Classical dynamics generated by this model was recently shown to exhibit an immense variability of the dynamical modes [12, 13]. The rise of ordered modes from the chaotic ones and their breakdown are phenomena observed at numerous places in the plane of energy versus control parameter—and in a majority of cases they are not properly understood yet. Very similar properties have been assigned also to the interacting boson model [14–16], which is closely related to the geometric collective model. A detailed analysis of dynamical features of these models is an interesting and important subject in the context of nuclear physics. However, we consider these models to be very well suited also for more generally oriented studies, such as those seeking answers to the above questions.

The classical analysis of chaos in the geometric collective model has been presented in Refs. [12, 13]. In the present paper, we focus on the analysis of quantum properties. We restrict ourselves to a subset of quantum levels with zero angular momentum, which makes the configuration space effectively two-dimensional, in contrast to five-dimensional space corresponding to general motions. It is then shown that the classical version of the model for zero rotations can be quantized in two physically meaningful ways. We solve the eigenvalue problem in both cases and compare the level statistics obtained, looking particularly into the regions where transitions between regular and chaotic dynamics take place. The possibility of changing the value of a classicality (Planck) constant enables us to populate the spectrum with variable density of quantum states, which is used for a global inspection of large energy domains and zooming in some finer details.

The previous paragraph outlined the content of the present part of this paper, further referred to as Part I. In the forthcoming part, Part II [17], the method invented by Peres [18] will be applied to the geometric model. The method, which exploits specific information on the structure of individual eigenstates, makes it possible to draw the spectrum of a quantum system in a way

that allows one to visually allocate regular and chaotic domains. A close relation to classical dynamics, in particular an analogy with the graphical method based on Poincaré sections, will be demonstrated.

The plan of the present part of the paper is as follows: In Sec. II (and in Appendix A), we introduce the model with its alternative quantizations and discuss some technical issues related to its numerical solution. The method used to evaluate the spectral statistics is described in Sec. III. In Sec. IV, the results of the statistical analysis are presented and compared with the corresponding classical measures of chaos. Conclusions are contained in Sec. V.

II. THE MODEL

A. 5D and 2D Hamiltonians

In this section we introduce the Hamiltonian of the Geometric Collective Model (GCM) for zero rotations, $J = 0$, and provide two different ways of its quantization, which are referred to as five-dimensional (5D) and two-dimensional (2D) cases.

The kinetic and potential terms of the GCM Hamiltonian $H = T + V$,

$$T = \frac{\sqrt{5}}{2K} [\pi \times \pi]^{(0)}, \quad (1)$$

$$V = \sqrt{5}A [\alpha \times \alpha]^{(0)} - \sqrt{\frac{35}{2}}B [[\alpha \times \alpha]^{(2)} \times \alpha]^{(0)} + 5C \left([\alpha \times \alpha]^{(0)} \right)^2, \quad (2)$$

are built from generalized complex coordinates $\alpha \equiv \alpha_\mu^{(2)}$ (with $\mu = -2, \dots, +2$) and the corresponding conjugate momenta $\pi \equiv \pi_\mu^{(2)}$, which are both spherical tensors of rank 2. Parameter K in the kinetic part has the meaning of mass, while $\{A, B, C\}$ determine the form of the potential. Note that $[a \times b]^{(\lambda)}$ stands for a coupling of general tensors a and b to angular momentum λ . The Hamiltonian is rotationally invariant since it contains only scalar couplings of coordinates and momenta.

The model is usually approached via an expansion of the nuclear radius into spherical harmonics, $R = R_0(1 + \sum_{\lambda\mu} \alpha_\mu^{(\lambda)*} Y_\mu^{(\lambda)})$, with only the $\lambda = 2$ terms taken into account; hence the name geometric model. However, the coordinates can also have different interpretations keeping only their quadrupole tensor character. The geometric Hamiltonian in the above form was introduced by Aage Bohr in 1952 [19]. A way of systematic construction of higher-order terms in both potential and kinetic parts of the Hamiltonian was presented by Gneuss, Mosel, and Greiner [20]. Several other types of potential have been considered in connection with shape transitions in nuclei. An overview of these potentials with relevant references and the corresponding quantum solutions can be found in Ref. [21].

Coordinates α satisfy the constraint $\alpha_\mu^{(2)*} = (-)^\mu \alpha_{-\mu}^{(2)}$ and therefore contain five independent real variables. Two of these variables capture the intrinsic shape of the nucleus (with a quadrupole deformation) and the remaining three variables describe the orientation of the nucleus in the laboratory frame (they can be associated with the Euler angles transforming the lab frame to the intrinsic one). In the intrinsic frame, only the shape variables are relevant. These are connected with the two independent scalar combinations of α 's in Eq. (2) and are usually parametrized as follows:

$$\alpha_0^{(2)} \equiv \beta \cos \gamma \equiv x, \quad \sqrt{2} \operatorname{Re} \alpha_{\pm 2}^{(2)} \equiv \beta \sin \gamma \equiv y \quad (3)$$

($\alpha_{\pm 1}^{(2)} = 0$). This yields the potential in the form:

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

Standard quantization procedure with $\pi_\mu = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha_\mu}$ leads to the kinetic term [19]

$$T^{5D} = -\frac{\hbar^2}{2K} \left(\frac{1}{\beta^4} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta^4 \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2 \sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right) + T_{\text{rot}}, \quad (5)$$

where T_{rot} stands for a nontrivial rotational part of the kinetic energy, containing the derivatives with respect to Euler angles and coupling all five dynamical variables. Since we restrict ourselves only to nonrotating regimes, $J = 0$, we set $T_{\text{rot}} = 0$. This can be seen as a projection of the full 5D coordinate system into an effectively two-dimensional space describing vibrational degrees of freedom β and γ . Note, however, that this projection differs from the 2D case by a modified definition of the scalar product, namely:

$$\langle \Psi_1^{5D} | \Psi_2^{5D} \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \Psi_1^{5D*} \Psi_2^{5D} \underbrace{\beta^4 |\sin 3\gamma|}_{\mathcal{N}} d\beta d\gamma, \quad (6)$$

where $\Psi_i^{5D}(\beta, \gamma)$, with $i = 1, 2$, stands for two wave functions and $\mathcal{N}(\beta, \gamma)$ represents a measure. Appendix A gives some details, see in particular Eq. (A8). The normalization condition $\langle \Psi^{5D} | \Psi^{5D} \rangle = 1$ leads to another class of solutions than would apply in case of a genuinely 2D Hamiltonian.

For $J = 0$, however, the truly 2D scheme represents an alternative way of quantization. It means that we put the system into the intrinsic frame first and only then carry out the quantization. The kinetic term obtained in this way reads as follows:

$$T^{2D} = -\frac{\hbar^2}{2K} \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right), \quad (7)$$

which is nothing but the standard 2D kinetic energy expressed in polar coordinates $(r, \phi) \equiv (\beta, \gamma)$. The scalar product in this case is defined in the usual way, therefore the space of solutions coincides with $L^2(\mathbb{R}^2)$. Note that

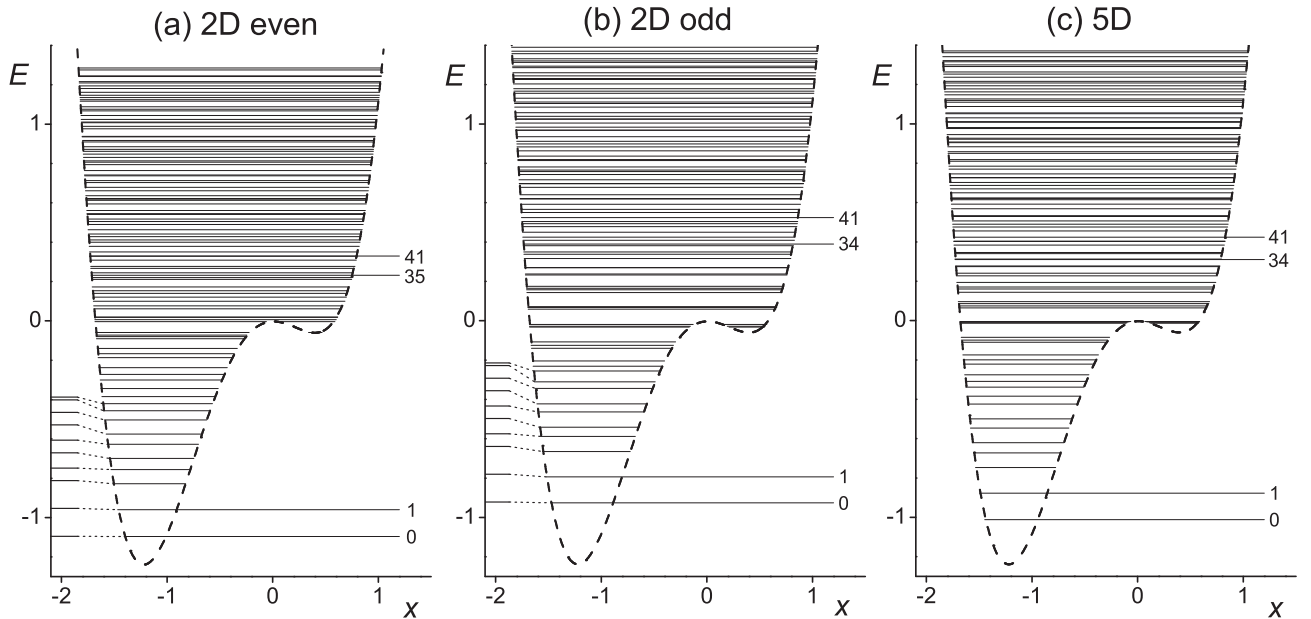


FIG. 1: Energy levels of the GCM Hamiltonian for $A = -1$, $B = 1.09$, $C = 1$, and $\hbar^2/K = 25 \cdot 10^{-4}$ drawn inside the $y = 0$ section of the potential well. Energy is given in relative units. Panels (a) and (b), respectively, show even and odd states in the 2D quantization, panel (c) corresponds to the 5D quantization. Levels associated with the wave functions in Fig. 2 are marked with their respective ordinal numbers. In both 2D cases, levels of the harmonic-well approximation are drawn on the left.

the Hamiltonian given by Eqs. (7) and (4) is a generalization of the widely studied Hénon-Heiles model [22]. Let us stress that in the nuclear physics context only the 5D quantization is correct.

Both forms (5) and (7) have the same classical limit for $J = 0$. The corresponding Hamiltonians H^{5D} and H^{2D} , respectively, with the common potential (4), enable one to study the impact of the quantization method on spectral correlations. Although individual energy eigenvalues obtained in both quantizations are different, we may assume—as implicit in Bohigas’ conjecture—that the spectral statistics remains essentially the same (after correctly separating levels with different conserved quantum numbers in both cases). The validity of this assumption will be discussed in Sec. IV. Note that despite the 2D and 5D quantum Hamiltonians carry a clear physical meaning, they represent just two options out of an infinite number of quantization possibilities.

B. Numerical solution

Both versions of the $J = 0$ GCM Hamiltonian are diagonalized numerically, using the eigenbases of a 5D or 2D harmonic oscillator. The oscillator Hamiltonian reads as $H_{\text{osc}}^\bullet = T^\bullet + V_{\text{osc}}$, where $V_{\text{osc}} = A_{\text{osc}}\beta^2$ (with A_{osc} being an arbitrary positive constant whose optimal choice will be discussed later) and T^\bullet stands for the 5D or 2D kinetic operator (5) or (7), respectively (we denote $\bullet = 5D$

or 2D). A general GCM Hamiltonian $H^\bullet = T^\bullet + V$ is expressed as $H^\bullet = H_{\text{osc}}^\bullet + V'$, where $V' = V - V_{\text{osc}}$. It turns out that matrix elements of V' in both oscillator bases can be expressed analytically, which makes the process of numerical diagonalization very efficient. Details and explicit expressions can be found in Appendix A.

The original 5D solution of the GCM possesses several implicit symmetries, namely

$$\Psi^{5D}(\beta, \gamma) = \Psi^{5D}\left(\beta, \gamma + \frac{2\pi}{3}\right), \quad (8)$$

$$\Psi^{5D}(\beta, \gamma) = \Psi^{5D}(\beta, -\gamma), \quad (9)$$

with Ψ^{5D} an arbitrary wave function in 5D. These relations arise from the ambiguity of the system’s orientation in the intrinsic frame. On the other hand, solutions of the 2D model do not a priori satisfy such symmetries. If the spectra associated with both quantizations are to be compared, conditions (8) and (9) need to be imposed externally also to the 2D case. This is done by selecting a subset $\Psi_{E, nm}^{2D}$ (where E stands for even in variable γ) of the 2D oscillator basis in which the diagonalization is carried out (see Appendix A). In addition, if we relax condition (9) and require only the equality of absolute values of the wave functions involved, we can take into account another independent class of 2D solutions, namely the wave functions odd in variable γ , i.e. satisfying $\Psi^{2D}(\beta, \gamma) = -\Psi^{2D}(\beta, -\gamma)$. These are obtained by diagonalization in the subset $\Psi_{O, nm}^{2D}$ of the 2D oscillator states (Appendix A).

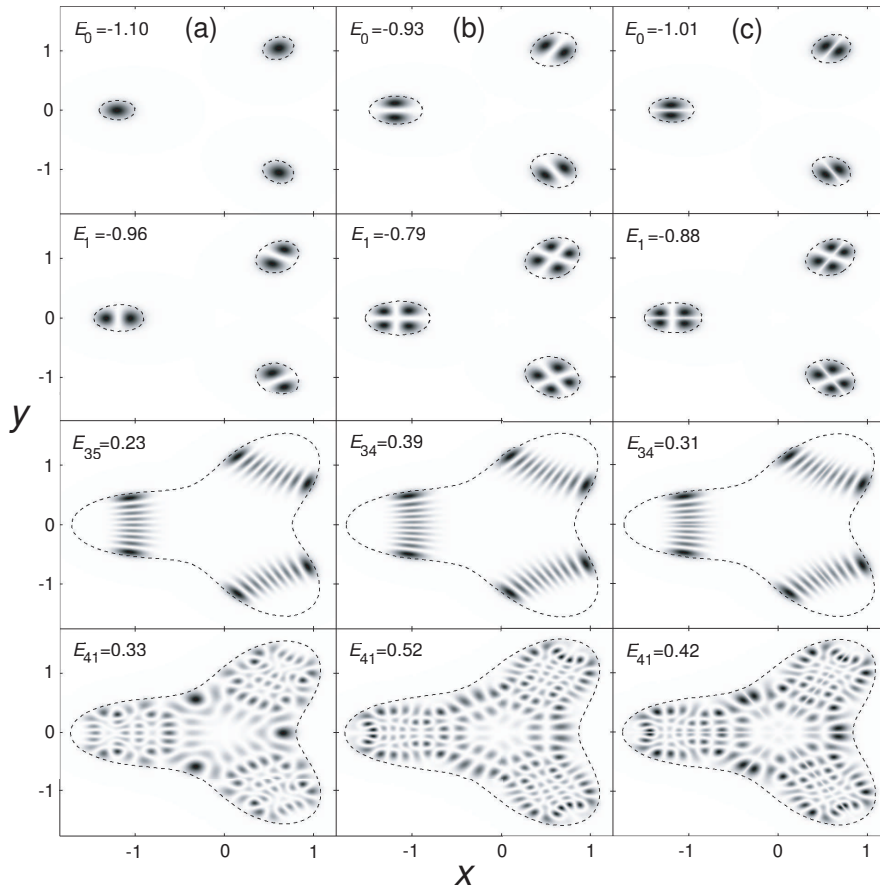


FIG. 2: Probability densities derived from the wave functions for selected levels from Fig. 1. Columns (a), (b), and (c) show the 2D even, 2D odd, and 5D cases, respectively. All distributions are constrained by the three-fold symmetry of the potential. The dashed lines demarcate the kinematically accessible area at given energy; cf. the dashed lines in Fig. 1. The states in two upper rows belong to the region where the quadratic-well approximation of the potential is valid. The third and fourth row, respectively, depict examples of regular and chaotic states with higher energies.

The Hamiltonian matrix expressed in the truncated oscillator basis has a band form. The band width is approximately equal to the maximal value of the principal quantum number in the selected subset of basis states. This makes the diagonalization feasible even at relatively high dimensions. The convergence of solutions is checked by a visual inspection of the distribution of eigenvector components in the oscillator basis (a bad convergence is signaled by missing tails of the computed distributions) and/or by trial calculations using variable size of the basis (we test the stability of computed eigenvalues against an increase of the dimension). Our procedure guarantees that the precision δE of individual eigenvalues satisfies the condition $\delta E \ll \Delta E$, where ΔE is an average spacing between levels in the selected part of the spectrum. This is needed for the determination of the nearest-neighbor spacing distribution.

In order to make the net spectra of converged eigen-solutions as large as possible, we optimize the oscillator parameter A_{osc} that determines a characteristic scale of the basis wave functions. The procedure is based on the

determination of the A_{osc} value for which the trace of the GCM Hamiltonian in the truncated basis is minimal (the optimal choice of A_{osc} is however lower than this value, as empirically verified for the parameter ranges studied here). Taking all these issues into account, we have found that on a common personal computer one can employ up to 10^5 basis states and obtain up to about $5 \cdot 10^4$ well converging eigensolutions (exact numbers still depend on the choice of external parameters).

An example showing all three classes of solutions—i.e., 2D even, 2D odd, and 5D—is plotted in Fig. 1. Here, parameters of Eq. (4) were chosen such that the potential has a minimum at $\beta \neq 0$. Although the spectra in the three panels of Fig. 1 look different, very close similarities become apparent when comparing also the corresponding wave functions. This is done for selected levels in Fig. 2. At very low energies, the system is fully regular since the minimum of the potential (4) can be approximated by a quadratic well. Wave functions belonging to this region are seen in the first and second rows of Fig. 2. On the other hand, the region of mixed dynamics is exem-

plified by wave functions in the third and fourth rows, which correspond to regular and chaotic cases, respectively. Indeed whereas wave functions in the third row exhibit regular behavior (the wave function is localized within an area following some specific classical periodic orbits [5]), wave functions in the fourth row show diverse structures and cover the whole accessible area.

It should be noted that the 2D and 5D cases differ in the differential element needed to calculate the probability distribution in the $x \times y$ plane. In the 2D quantization we simply have $|\Psi^{2D}(x, y)|^2 dx dy = |\Psi^{2D}(\beta, \gamma)|^2 |\mathcal{J}| d\beta d\gamma$, where $\mathcal{J} = \beta$ is the Jacobian of the transformation from (x, y) to (β, γ) . The first two columns of Fig. 2 show just the squared modulus of the respective wave functions. In the 5D case, however, all matrix elements contain the measure \mathcal{N} from Eq. (6). In the rightmost column of Fig. 2 we show the squared wave function $|\Psi^{5D}(\beta, \gamma)|^2$ multiplied by a factor $\mathcal{N}/\mathcal{J} = \beta^3 |\sin 3\gamma|$. The resulting 5D density therefore vanishes where $\sin 3\gamma = 0$, so it is visually similar to the 2D *odd* case, in spite of the condition (9). This is also why the ground-state density in Fig. 2(c) has two maxima in each potential well, although the wave function itself has no node.

Let us finally briefly remark on the choice of parameters in this work. It is closely connected with the scaling properties of the GCM Hamiltonian discussed in Refs.[13, 23]. In the classical case [13], only one of the parameters $\{A, B, C\}$ determines the scale-independent behavior of the system, while the others and K can be set to +1 or ± 1 for A . In the quantum case [23], the classicality parameter $\kappa = \hbar^2/K$ (whose changes can be viewed either as changes of the Planck constant, or as changes of the mass) constitutes the second independent parameter of the model which cannot, in general, be scaled to unity. This parameter determines the absolute density of states.

In the following, we take B as the principal control parameter and choose κ to locate a sufficient number of levels into the energy region of interest. The remaining parameters are fixed to $(A, C) = (-1, +1)$, which in the nuclear context corresponds to nuclei with stable ground-state deformations. For $B = 0$, the system is completely integrable (since in this case the Hamiltonian does not depend on γ and the $x \times y$ angular momentum is an obvious integral of motions). Therefore, the value of parameter B represents the strength of a nonintegrable perturbation.

Let us note that all the above-introduced quantities and parameters are considered here dimensionless. The conversion to a concrete scale requires to choose the same unit for energy E and parameters A, B, C , and κ . In nuclear context, the unit of $\{A, B, C\}$ is set by the form of the potential (e.g. the depth of the minimum). The appropriate value of κ (connected with the effective mass parameter K) can then be determined by adjusting the number of states in a certain interval (e.g. below $E = 0$).

III. SPECTRAL STATISTICS

According to Bohigas' conjecture [9], chaotic systems exhibit strong correlations between levels, which result in an effect known as "spectral rigidity". The short-range component of these correlations is most clearly manifested in the distribution of the nearest-neighbor spacings (NNS), i.e. gaps between neighboring levels in a transformed (so-called unfolded) spectrum. In fully chaotic systems, this distribution is amazingly well approximated by the Wigner distribution, while in systems with regular classical counterparts the NNS distribution tends to be Poissonian.

A suitable quantity allowing one to interpolate between the two limiting cases is the Brody parameter ω [24]. It is defined through the distribution

$$P(s; \omega) = (\omega + 1) \alpha_\omega s^\omega \exp(-\alpha_\omega s^{\omega+1}), \quad (10)$$

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

where s is the spacing between adjacent levels in the unfolded spectrum and α_ω a factor resulting from the required conditions $\int_0^\infty P(s; \omega) ds = 1$ (normalization) and $\int_0^\infty s P(s; \omega) ds = 1$ (unfolding). Eq. (10) interpolates between the Poisson ($\omega = 0$) and Wigner ($\omega = 1$) distributions, hence a value $\omega \in [0, 1]$ obtained from a concrete spectrum tells us where between order and chaos the actual system is. In spite of an artificial character of this interpolation, it has been argued that the Brody distribution is capable of fitting the data generated by realistic systems with mixed dynamics [25].

We use the following procedure: Eigenstates obtained by the Hamiltonian diagonalization in a sufficiently large basis are split into groups (bins), each of them counting 1000 consecutive levels. The standard polynomial unfolding procedure [26] is applied in each group, removing locally a smooth part of the level density and normalizing the average spacing to unity. To obtain the Brody parameter, we use the identity following from Eq. (10) [27]:

$$\ln \ln[1 - I(s; \omega)]^{-1} = \ln \alpha_\omega + (1 + \omega) \ln s. \quad (11)$$

Here, $I(s; \omega) = \int_0^s P(s'; \omega) ds'$ can be estimated from a cumulative histogram of spacings in the unfolded spectrum. A simple linear fit of the expression on the left-hand side of Eq. (11) in the logarithmic scale of variable s yields the Brody parameter ω for each bin of levels. An example is shown in Fig. 3. The bins subject to the above evaluations increase in energy and overlap with each other (the shift between successive bins was set to 100 levels). The average energy of each bin is drawn on the abscissa in the resulting dependence of ω on E (cf. Figs. 6–5 below).

Although the linear fit (11) can be easily implemented and demonstrates the validity of the Brody approximation over a broad domain of spacings, it may increase

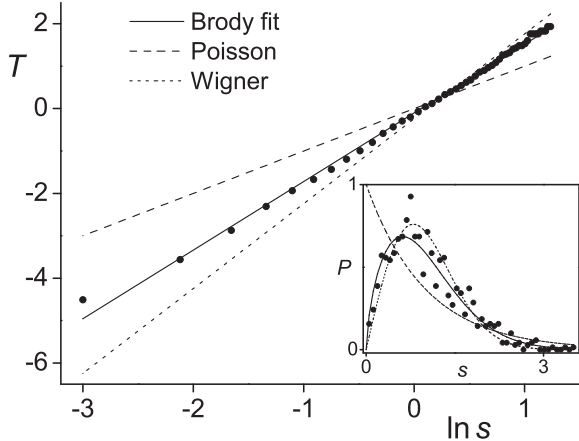


FIG. 3: An example of the linear fit illustrating the determination of the Brody parameter from an unfolded spectrum of levels within a single bin [it belongs to the dotted line in Fig. 5(b) at $E \sim 1.33$]. The left-hand side of Eq. (11) is denoted as T . The NNS distribution and its fitted Brody approximation (with $\omega = 0.62$) are shown (by the full line) in the inset. Dashed and dotted lines correspond to Poisson and Wigner distributions, respectively.

the relative weight of large values of s in the calculation of ω [27]. We have performed a numerical simulation showing that the value of the Brody parameter determined in this way may be decreased by an absolute value $\Delta\omega_{\text{sys}} \approx -0.08$, while the statistical error resulting from finiteness of the sample of levels is estimated as $\Delta\omega_{\text{stat}} \approx \pm 0.07$. These uncertainties should be taken into account when evaluating the dependence of ω on energy, see Sec. IV.

We tried to implement also the new method [10] based on the $1/f^\alpha$ noise in spectral fluctuations, with $\alpha \in [1, 2]$ corresponding to spectra in between fully chaotic ($\alpha = 1$) and fully regular ($\alpha = 2$) limits. The advantage of this method lies in its simple and elegant formulation (with no explicit reference to random matrix ensembles) and in the fact that it simultaneously captures both short- and long-range spectral correlations.

In our case, however, the results were not quite satisfactory. The reason—an insufficient statistics—may be anticipated to be present in a majority of systems in which the competition between regular and chaotic motions quickly varies with energy. Indeed, the work [10] demonstrates the power of the $1/f^\alpha$ method on the Robnik billiard that (as all billiard or cavity systems) exhibits a constant, energy-independent ratio between regular and chaotic phase-space volume. This allowed the authors to average over a huge number of successive sets of levels and to get very precise results. In contrast, properties of individual GCM trajectories cannot be trivially scaled with energy. This feature, which in fact repre-

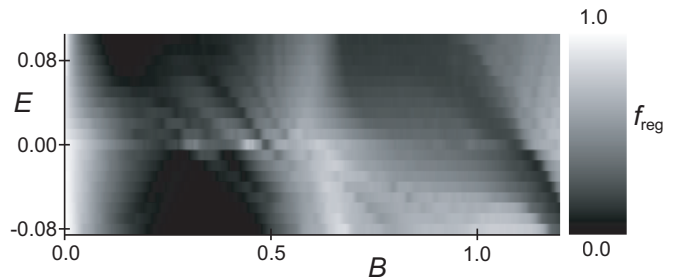


FIG. 4: Regular fraction f_{reg} of the classical phase space as a function of the control parameter B and energy E in a vicinity of $E \approx 0$. The degree of chaos is coded in shades of gray, with white (black) corresponding to complete order (chaos). One may notice an island with increased regularity near $B \approx 0.6$. The number of bins in the B direction is much larger than that in the E direction.

sents an important motivation for the detailed analysis of the present system, results in a significant increase of the statistical error of the deduced (energy-dependent) exponents α , in some cases even exceeding 30%.

IV. RESULTS

In this section, we will compare the quantum measure of regularity (Brody parameter) obtained in the way described in Sec. III with the corresponding classical measure. We will focus on the influence of the different quantization schemes and on the dependence of results on the classicality parameter κ .

In our previous work [12, 13], classical measures of chaos in the geometric model were studied. We solved the classical equations of motions for a number N_{tot} of trajectories with fixed energy E and then, using the method based on so-called alignment indices [28], classified each trajectory as either regular or chaotic [13]. In order to quantify the overall degree of regularity at given energy, we calculated a regular fraction of the phase space $f_{\text{reg}} = N_{\text{reg}}/N_{\text{tot}}$, where N_{reg} represents the number of regular trajectories in the sample. The regular fraction f_{reg} takes values from 0 (fully chaotic dynamics) to 1 (fully regular dynamics) and it can be compared with an adjunct $(1 - \omega)$ of the Brody parameter.

In the classical case, the dependence of f_{reg} on energy and control parameter B exhibits very complex non-monotonous behavior, which is for energies around $E = 0$ depicted in Fig. 4. The following features of this dependence are worth mentioning: First, the system is regular for small values of B , since $B = 0$ represents a fully integrable limit of the model (see the end of Sec. II). Second, a well-pronounced island of regularity in a wide range of energies is observed at $B \approx 0.6$. As shown in Ref. [16], this region is connected with the so-called regular arc of the interacting boson model [14, 15]. Third, increased values of the regular fraction are observed for some values of B at $E \approx 0$. The absolute energy $E = 0$ corresponds

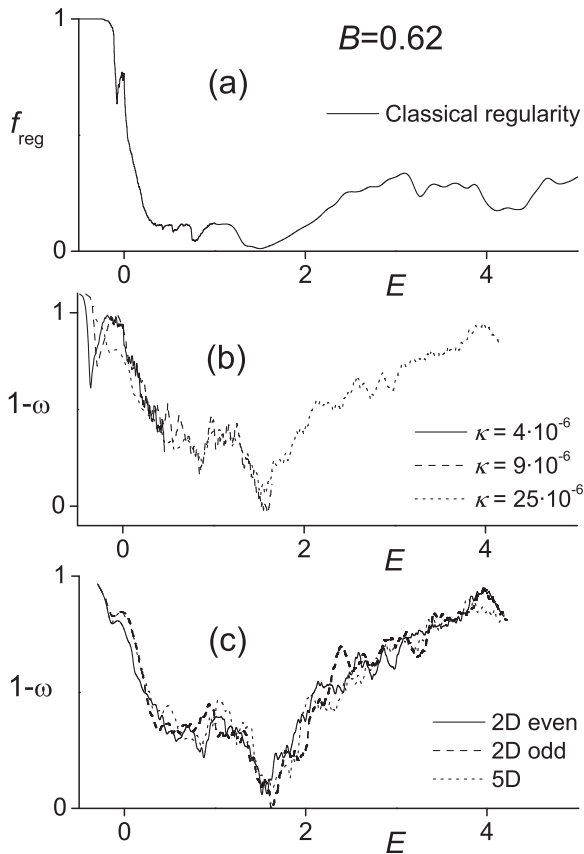


FIG. 5: A comparison between the classical regular fraction f_{reg} (panel a) and an adjunct $(1 - \omega)$ of the Brody parameter (panels b and c) for $B = 0.62$ (the main maximum of regularity at $E = 0$). Results for different values of κ in the 2D even case are shown in panel (b), while results for different types of quantization for $\kappa = 25 \cdot 10^{-6}$ are presented in panel (c). A reasonable agreement of classical and quantum measures is observed. The jittering of individual curves is caused by statistical errors.

to a local maximum of the potential (4) at $\beta = 0$.

Figures 5–7 depict the dependence of both measures f_{reg} and $(1 - \omega)$ on energy. The classical measure is always shown in the uppermost panel. The value of the Hamiltonian parameter B in the three figures was chosen as $B = 0.62$, $B = 1.09$, and $B = 0.24$, respectively, with regard to the location of some extremes of regularity at $E = 0$ [12]. The energy range shown in the figures represents the most interesting region, lying between the domains of full regularity at very low and very high energies. For energies just above the global minimum of the potential the system is entirely regular due to the validity of the harmonic-well approximation. With increasing energy, the regularity suddenly breaks down and continues falling sharply until it nearly reaches zero. After this stage, it takes off again, somewhat surprisingly, and

exhibits several well pronounced peaks of highly regular motions, which are separated by valleys of more chaotic dynamics. These structures can be seen in Figs. 5–7. For sufficiently high energies, not shown in the present figures, the regularity starts growing steadily toward the fully regular limit, following roughly a logarithmic dependence. This is connected with the dominance of the β^4 term of the potential at high energies [12, 13].

The lower panels of Figs. 5–7 show the corresponding quantum measure, the adjunct of the Brody parameter. In accord with the discussion in Sec. III, we estimate the absolute errors of the $(1 - \omega)$ curves as -0.07 and $+0.11$. The reason for different error sizes in up and down directions is the above-discussed systematic error, which tends to underestimate the value of ω . On the other hand, a numerical error of f_{reg} was estimated as $\lesssim 5\%$ [13]. If the errors are taken into account, the fluctuations observed in the lower panels of all three figures are smoothed out and the overall correspondence between f_{reg} and $(1 - \omega)$ becomes rather good. In particular, the observed maxima and minima of both curves coincide. It turns out that the Brody parameter tends to slightly overestimate the regularity—this being so even if the above systematic error is considered. Note that a similar behavior was observed for the exponent α in the $1/f^\alpha$ noise analysis [10]. Indeed, there is no reason to expect that f_{reg} and $(1 - \omega)$ behave in exactly the same way. We only expect a qualitative agreement, and that is fully confirmed in the present calculation.

A remark is needed concerning the minimum seen in Fig. 5(b) just below $E = 0$ for lower values of κ . It has no apparent counterpart in panel (a). Indeed, this minimum is only an artifact connected with the resonance of β and γ vibrational energies at $B = 0.62$ [16]. The appearance of nearly equidistant bunches of levels in the resonance region causes a serious deviation of the NNS distribution from the Brody form, which results in a nonrealistic value of the Brody parameter. The discrepancy is localized only in a relatively narrow interval and gets washed out as κ increases (the incriminated energy region is populated by a decreasing number of levels; a similar effect was discussed in Ref. [29]).

The dependence of the quantum results on the classicality constant κ is shown in Figs. 5(b) and 6(b). We observe that the value of κ does not affect the energy dependence of the Brody parameter. Mutual deviations of the curves for various κ are bound inside the standard error interval. Instead, the curves for distinct κ differ in the width of the displayed energy range. It has the following reason: Since a decreasing value of the classicality parameter raises the density of the spectrum, the plots for smaller κ are more detailed but cannot reach higher energies because of computational limitations of the diagonalization procedure. In our case, $3 \cdot 10^4$ reliable energy levels were calculated for each value of κ (the dimension of the diagonalized matrix being about two times larger) and the curves are cut at the centroid energy of the uppermost bin of levels (see Sec. III).

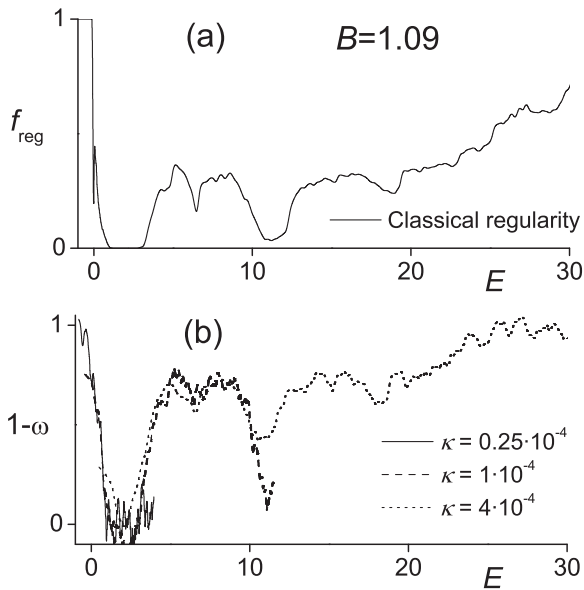


FIG. 6: The same as in Fig. 5, but for $B = 1.09$ (a minimum of regularity for $E = 0$). Only the 2D even quantization is analyzed for different values of κ .

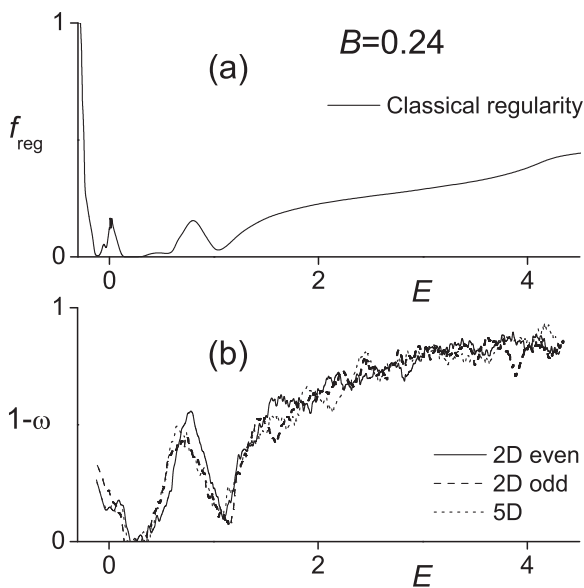


FIG. 7: Classical (a) and quantum (b) chaotic measures for $B = 0.24$ (a minimum of regularity for $E = 0$). Only results with $\kappa = 25 \cdot 10^{-6}$ are shown in panel (b) for various quantizations (fluctuations are caused by statistical errors).

The dependence of the quantum measure of chaos on the method of quantization is shown in Figs. 5(c) and 7(b). As was demonstrated in Fig. 1, the spectra obtained by the three types of quantizations (we consider the 2D quantization scheme further split into the odd and even cases, see Sec. II A) differ from each other distinctly. The question concerning the validity of Bohigas' conjecture in all quantizations has been raised above. The answer is evident from the present results: The Brody parameter for all quantization schemes exhibits essentially the same dependence on energy, the mutual deviations being fully within the range of standard errors. Therefore, we can report that full agreement with Bohigas' conjecture is confirmed in the present model independently of the chosen quantization scheme.

V. CONCLUSIONS

We have studied the correspondence between classical and quantum measures of chaos in the geometric collective model adopted from nuclear physics. In spite of its conceptual simplicity, the model exhibits enormous complexity of solutions, with a very sensitive dependence of the observed behaviors on external parameters and energy. These features qualify the model for being a subject of detailed analyses of the competition between regular and chaotic modes of motions on both classical and quantum levels.

Although the dependence of chaotic measures on some external control parameters has been extensively studied in quantum billiards, see e.g. Refs. [30, 31], the dependence on energy has been marginalized so far. This is partly because billiard systems do not permit this kind of analysis—their chaotic features are always uniform in energy. Even the studies based on “soft” potential systems have been so far focused mostly on the cases with a relatively simple energy dependence of chaotic measures, see e.g. Refs. [22, 29, 32]. The collective Hamiltonians used in Refs. [14–16] and also those studied in Refs. [12, 13] provide a very different perspective. In this sense, the present work can be considered as complementary to the studies based on two-dimensional billiard systems. We have demonstrated that a tight connection between classical and quantum measures of chaos, embodied in the well-known Bohigas' conjecture [9], remains valid even under the condition of a strong energy dependence.

Another important conclusion of our work is the observed independence of quantum chaotic measures on the method used to quantize the system. Since the definition of quantum chaos is based on the system's semiclassical limit, it would be very surprising to find the opposite—i.e. statistical properties of spectra depending on the quantization. However, the question deserves to be tested. The present work is probably only a first step in this direction.

Finally, our results show that the Brody parameter, despite of being often deprecated, represents a reason-

ably sensitive measure of chaos in quantum system. We nevertheless do not stop at this stage. In the forthcoming part of this paper [17], features of the geometric model are analyzed with the aid of the method proposed by Peres [18]. This method enabled us to study the breakdown and reoccurrence of ordered quantal spectra with running parameter B in a much more detailed way.

Acknowledgments

The authors would like to thank M. Kladiiva, M. Macek, and D. Bucurescu for fruitful discussions. This work was supported by the Czech Science Foundation (grant no. 202/06/0363) and by the Czech Ministry of Education (contracts no. 0021620859 and LA 314).

APPENDIX A: HAMILTONIAN MATRIX ELEMENTS

Here we expose the 2D and 5D oscillator wave functions used for the diagonalization of both versions of the GCM Hamiltonian for $J = 0$ and write down explicit expressions for relevant matrix elements. There exists a tight connection between the 2D and 5D bases, which shows up particularly in the form of matrix elements. Note that our derivation of matrix elements is based on Ref. [33], but an alternative algebraic approach was recently presented also in Ref. [34].

We employ the 2D and 5D oscillator bases in radial coordinates β and γ . The oscillator Hamiltonian is given by $H_{\text{osc}}^{\bullet} = T^{\bullet} + A_{\text{osc}}\beta^2$, where $\bullet = 2\text{D}$ or 5D and T^{\bullet} is the kinetic energy (7) or (5). The oscillator eigenstates in the 2D and 5D cases are denoted as $|nm\rangle$ and $|\nu\mu\rangle$, respectively, where n and ν represent the corresponding radial quantum numbers. These states are also eigenstates of the angular momentum associated with the rotations varying angle γ , therefore they carry good quantum number m corresponding to the $O(2)$ invariant in the 2D case, or μ corresponding to the $O(5)$ invariant with $J = 0$ in the 5D case [35]. Matrix elements of a general GCM Hamiltonian in these bases can be calculated analytically.

Starting with the 2D case, the basis wave functions read as

$$\langle\beta, \gamma|nm\rangle \equiv \Psi_{nm}^{2\text{D}}(\beta, \gamma) = R_{nm}^{2\text{D}}(\beta)\Phi_m^{2\text{D}}(\gamma) \quad (\text{A1})$$

with the radial and angular parts given by

$$\begin{aligned} R_{nm}^{2\text{D}}(\beta) &= \sqrt{\frac{2kn!}{(n+3m)!}} (k\beta^2)^{\frac{3m}{2}} e^{-\frac{k\beta^2}{2}} L_n^{3m}(k\beta^2) \\ \Phi_{0m}^{2\text{D}}(\gamma) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin 3m\gamma \quad m = 0, 1, \dots \\ \Phi_{Em}^{2\text{D}}(\gamma) &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} & \text{if } m = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos 3m\gamma & \text{if } m = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (\text{A2}) \end{aligned}$$

Here, L_n^m denotes the Laguerre polynomial and $k = \sqrt{2A_{\text{osc}}K}/\hbar$. The angular part is written for both odd (O) and even (E) cases. Note that we have applied the

symmetry condition (8), selecting only the states with angular momentum quantum numbers equal to multiples of 3. The states are normalized as follows,

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty R_{n'm}^{2\text{D}}(\beta)R_{nm}^{2\text{D}}(\beta)\beta d\beta \\ &\times \int_0^{2\pi} \Phi_{Xm'}^{2\text{D}}(\gamma)\Phi_{Xm}^{2\text{D}}(\gamma) d\gamma = \delta_{m'm}\delta_{n'n}, \quad (\text{A3}) \end{aligned}$$

with X standing for O or E.

Following Ref. [33] (where however a different normalization of Laguerre polynomials is used), we can calculate the relevant matrix elements. First, the oscillator Hamiltonian itself trivially yields

$$\langle n', m'|H_{\text{osc}}^{2\text{D}}|nm\rangle = \hbar\Omega(2n+3m+1)\delta_{n'n}\delta_{m'm}, \quad (\text{A4})$$

where $\Omega = \sqrt{2A_{\text{osc}}K}$. To calculate matrix elements of a general Hamiltonian $H^{2\text{D}}$, we need to know matrix elements of the individual terms in $V' = (A - A_{\text{osc}})\beta^2 + B\beta^3 \cos 3\gamma + C\beta^4$. The radial parts of these elements can be read off from Tab. I and the angular contribution is given by

$$\langle n', m+1|\cos 3\gamma|nm\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} & \text{if } m = 0 \\ \frac{1}{2} & \text{if } m = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (\text{A5})$$

(for other combinations of basis states, the matrix elements vanish).

Let us turn now to the 5D case. Following the same procedure as above, we express the wave function

$$\langle\beta, \gamma|\nu\mu\rangle \equiv \Psi_{\nu\mu}^{5\text{D}}(\beta, \gamma) = R_{\nu\mu}^{5\text{D}}(\beta)\Phi_{\mu}^{5\text{D}}(\gamma) \quad (\text{A6})$$

with radial and angular components

$$\begin{aligned} R_{\nu\mu}^{5\text{D}}(\beta) &= \sqrt{\frac{2\nu!}{\Gamma(\nu+3\mu+\frac{5}{2})}} k^{\frac{5}{4}} (k\beta^2)^{\frac{3\mu}{2}} e^{-\frac{k\beta^2}{2}} L_{\nu}^{3\mu+\frac{3}{2}}(k\beta^2) \\ \Phi_{\mu}^{5\text{D}}(\gamma) &= \sqrt{\frac{2\mu+1}{4}} P_{\mu}(\cos 3\gamma) \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

satisfying the normalization

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty R_{\nu'\mu'}^{5\text{D}}(\beta)R_{\nu\mu}^{5\text{D}}(\beta)\beta^4 d\beta \\ &\times \int_0^{2\pi} \Phi_{\mu'}^{5\text{D}}(\gamma)\Phi_{\mu}^{5\text{D}}(\gamma)|\sin 3\gamma| d\gamma = \delta_{\mu'\mu}\delta_{\nu'\nu}. \quad (\text{A8}) \end{aligned}$$

In analogy with (A4) we have

$$\langle \nu', \mu'|H_{\text{osc}}^{5\text{D}}|\nu\mu\rangle = \hbar\Omega(2\nu+3\mu+\frac{5}{2})\delta_{\nu'\nu}\delta_{\mu'\mu}. \quad (\text{A9})$$

The radial matrix elements can be simply obtained from Tab. I after substitution $n \rightarrow \nu$, $m \rightarrow \mu$ on the left-hand side, and $n \rightarrow \nu$, $m \rightarrow \mu + 1/2$ on the right-hand side. The angular part reads as

$$\langle \nu', \mu+1|\cos 3\gamma|\nu\mu\rangle = \frac{\mu+1}{\sqrt{(2\mu+1)(2\mu+3)}}. \quad (\text{A10})$$

TABLE I: Matrix elements of the radial potential terms in the 2D oscillator basis. Matrix elements for other combinations of the oscillator states are zero.

$$\begin{aligned}
 \langle nm|\beta^2|nm\rangle &= k^{-1}(2n+3m+1) \\
 \langle n+1,m|\beta^2|nm\rangle &= -k^{-1}\sqrt{(n+1)(n+3m+1)} \\
 \langle n,m+1|\beta^3|nm\rangle &= k^{-3/2}\sqrt{(n+3m+3)(n+3m+2)(n+3m+1)} \\
 \langle n-1,m+1|\beta^3|nm\rangle &= -3k^{-3/2}\sqrt{n(n+3m+2)(n+3m+1)} \\
 \langle n-2,m+1|\beta^3|nm\rangle &= 3k^{-3/2}\sqrt{n(n-1)(n+3m+1)} \\
 \langle n-3,m+1|\beta^3|nm\rangle &= -k^{-3/2}\sqrt{n(n-1)(n-2)} \\
 \langle nm|\beta^4|nm\rangle &= k^{-2}[n(n-1)+(n+3m+1)(5n+3m+2)] \\
 \langle n+1,m|\beta^4|nm\rangle &= -2k^{-2}(2n+3m+2)\sqrt{(n+3m+1)(n+1)} \\
 \langle n+2,m|\beta^4|nm\rangle &= k^{-2}\sqrt{(n+3m+2)(n+3m+1)(n+2)(n+1)}
 \end{aligned}$$

- [1] *Chaos and Quantum Physics*, Les Houches, Session LII (1989), ed. M.-J. Giannoni *et al.* (Elsevier, Amsterdam, 1991).
- [2] M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1990).
- [3] L.E. Reichl, *The Transition to Chaos* (Springer, New York, 1992).
- [4] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos* (Springer, Berlin, 1992).
- [5] H.-J. Stöckmann, *Quantum Chaos. An Introduction* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1999).
- [6] T.A. Brody, J. Flores, J.B. French, P.A. Mello, A. Pandey, S.S.M. Wong, *Rev. Mod. Phys.* **53**, 385 (1981).
- [7] T. Gorin, T. Prosen, T.H. Seligman, M. Žnidarič, *Phys. Rep.* **435**, 33 (2006).
- [8] M. Berry, *Proc. Royal. Soc. A* **413**, 183 (1987); *Phys. Scripta* **40**, 335 (1989).
- [9] O. Bohigas, M.J. Giannoni, C. Schmit, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1 (1984).
- [10] A. Relaño, J. M. G. Gómez, R. A. Molina, J. Retamosa, E. Faleiro, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 244102 (2002); J. M. G. Gómez, A. Relaño, J. Retamosa, E. Faleiro, L. Salasnich, M. Vraničar, M. Robnik, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 084101 (2005).
- [11] A. Bohr, B. Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol. 2 (World Scientific, Singapore, 1998).
- [12] P. Cejnar, P. Stránský, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 102502 (2004).
- [13] P. Stránský, M. Kurian, P. Cejnar, *Phys. Rev. C* **74**, 014306 (2006).
- [14] Y. Alhassid, N. Whelan, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 816 (1991).
- [15] N. Whelan, Y. Alhassid, *Nucl. Phys.* **A556**, 42 (1993).
- [16] M. Macek, P. Stránský, P. Cejnar, S. Heinze, J. Jolie, J. Dobeš, *Phys. Rev. C* **75** 064318 (2007).
- [17] P. Stránský, P. Hruška, P. Cejnar, see arXiv:0902.4155 [quant-ph].
- [18] A. Peres, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1711 (1984).
- [19] A. Bohr, *Dansk. Mat. Fys. Medd.* **26**, 14 (1952).
- [20] G. Gneuss, U. Mosel, W. Greiner, *Phys. Lett. B* **30**, 397 (1969).
- [21] L. Fortunato, *Eur. Phys. J. A* **26**, s01, 1 (2005).
- [22] M. Hénon, C. Heiles, *Astron. J.* **69**, 73 (1964).
- [23] M. A. Caprio, *Phys. Rev. C* **68**, 054303 (2003).
- [24] T. A. Brody, *Lett. Nuovo Cimento* **7**, 482 (1973).
- [25] T. Cheon, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 529 (1990).
- [26] V. Plerou, P. Gopikrishnan, B. Rosenow, L. A. N. Amaral, T. Guhr, H. E. Stanley, *Phys. Rev. E* **65**, 066126 (2002).
- [27] T. Prosen, M. Robnik, *J. Phys. A* **26**, 2371 (1993); *ibid.* **27**, 8059 (1994).
- [28] Ch. Skokos, *J. Phys. A* **34**, 10029 (2001); **37**, 6269 (2004).
- [29] E. Haller, H. Köppel, L. S. Cederbaum, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1665 (1984).
- [30] A. Csordás, R. Graham, P. Szépfalussy, G. Vattay, *Phys. Rev. E* **49**, 325 (1994).
- [31] W. Li, L. E. Reichl, B. Wu, *Phys. Rev. E* **65**, 056220 (2002).
- [32] T.H. Seligman, J.J.M. Verbaarschot, M.R. Zirnbauer, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 215 (1984).
- [33] S. Bell, *J. Phys. B* **3** 735 (1970); **3** 745 (1970).
- [34] S. De Baerdemacker, Ph.D. thesis (University of Gent, 2008).
- [35] E. Chacón, M. Moshinsky, *J. Math. Phys.* **18**, 870 (1977).

Příloha V

Quantum chaos in the nuclear collective model: Peres Lattices

Přetisk článku [Str09b] publikovaného v časopise *Physical Review E* **79**, 066201 (2009).

Quantum chaos in the nuclear collective model: Peres lattices

Pavel Stránský, Petr Hruška, Pavel Cejnar

*Institute of Particle and Nuclear Physics, Faculty of Mathematics and Physics,
Charles University, V Holešovičkách 2, 180 00 Prague, Czech Republic*

This is a continuation of our paper [Phys. Rev. E **79**, 046202 (2009)] devoted to signatures of quantum chaos in the geometric collective model of atomic nuclei. We apply the method by Peres to study ordered and disordered patterns in quantum spectra drawn as lattices in the plane of energy vs. average of a chosen observable. A good qualitative agreement with standard measures of chaos is manifested. The method provides an efficient tool for studying structural changes of eigenstates across quantum spectra of general systems.

PACS numbers: 05.45.Mt, 24.60.Lz, 21.60.Ev

I. INTRODUCTION

In the previous part of this article [1] (Part I), we have analyzed the correspondence between classical and quantum signatures of chaos in the Geometric Collective Model (GCM) [2] of nuclear vibrations. Rotations were ruled out by the constraint of zero angular momentum. The classical version of this model was previously shown [3] to exhibit a very complex dependence of regular and chaotic measures on control parameters and energy.

In Part I [1], we have compared the classical measure f_{reg} , a regular fraction of the phase space volume, with the adjunct $(1-\omega)$ of the Brody parameter. The analysis of spectra was performed in a wide energy domain and for several values of the control parameter B of the GCM Hamiltonian. Spectra obtained via different quantization schemes of the classical model were considered, which led to the use of three different sets of quantum levels, denoted as 5D, 2D even, and 2D odd. Whereas the 5D spectrum corresponds to the standard five-dimensional GCM restricted to the nonrotating case, the 2D even and 2D odd spectra were derived from the quantization in the two-dimensional space of polar deformation coordinates β and γ , with the respective condition on the parity of wave functions under the reflection of angle γ .

In all cases, the validity of the Bohigas conjecture [4] has been fully confirmed. We stressed two important aspects of our calculation: First, Bohigas' conjecture has been verified independently of the quantization scheme. Second, because of the strong dependence of the GCM chaotic measures on energy, the competing types of level statistics have been analyzed in the local regime, i.e. for separate portions of the spectrum. Whether the statistics in a given portion is more of the Poisson or Wigner type depends on the character (regular or chaotic, respectively) of the classical dynamics in the corresponding energy interval. The nonmonotonous dependence of chaotic measures on energy is in contrast to a majority of systems used as case examples of chaos, in particular to all kinds of billiards (or cavities) for which the chaotic features are energy independent.

In this part of the contribution, we continue the work initiated in Part I by considering more sophisticated tech-

niques to describe chaos in quantum spectra. Given that the Brody parameter captures only the short-range spectral correlations, a natural way to extend the previous results would be to consider also some measures of the long-range correlations, like e.g. the Δ_3 statistics or the number variance Σ^2 [5]. This way we did not follow. The reason is connected with the above-mentioned nontrivial variation of chaotic measures with energy, which would unavoidably increase statistical ambiguity of such analyses.

Instead, we employed the method invented in 1984 by Peres [6]. While Bohigas' conjecture, which was published in the same year [4], has become a widely recognized paradigm of quantum chaos, Peres' method has been more or less forgotten. It is mentioned in the textbook [7], where some applications in integrable and non-integrable spin systems are discussed [8]. An application in a billiard system was presented later [9]. Today, however, Peres' name is more commonly cited in connection with his alternative definition of chaos in quantum systems [10], submitted and published with a difference of just few days, which became a cornerstone for presently a quickly expanding branch of the quantum information theory [11].

Nevertheless, the idea of Ref. [6] turns out to be very fruitful, as well. We will show below that the method based on this idea represents a sensitive probe into the competition between regular and chaotic features in quantum spectra. It can be applied even beyond the theory of quantum chaos, as a synoptical indicator of the changing structures across the spectrum containing possibly a very large number of states. In the two-dimensional case, the method is graphical and may be compared to the classical method of Poincaré sections. The spectrum of stationary states of a given quantum system with two degrees of freedom is drawn as a lattice in the plane $E \times \langle P \rangle$, where E is energy and $\langle P \rangle$ stands for an arbitrary observable average. This allows one to recognize ordered and disordered patterns and visually allocate regular and chaotic domains within the same energy interval. The freedom in choosing observable P makes it possible to focus on various properties of individual states and to closely follow the way how chaos

sets in and proliferates in the system.

The plan of the present paper is the following: Peres' method is introduced in Sec. II and elaborated for the geometric model in Sec. III. Section IV shows Peres lattices calculated with two choices of operator P for different values of control parameters and different quantizations. Discussion of these results and their comparison with results of Part I are presented. The summary and conclusions come in Sec. V.

II. PERES METHOD

Let us consider an *integrable* system with two degrees of freedom (a 2D system). Apart from the Hamiltonian H_0 , there must exist another integral of motion, denote it I , which by definition satisfies the commutation relation $[H_0, I] = 0$. If we plot the eigenvalues I_i of observable I against energies E_i for individual levels (enumerated by integer $i = 0, 1, 2, \dots$), the resulting image is formed by a lattice of regularly distributed points. This is a straightforward consequence of the semiclassical quantization by Einstein, Brillouin, and Keller (EBK) [12]. An example of such a regular lattice is shown in panel (a) of Fig. 1, with H_0 and I described in Sec. III. In the present section we focus on the left column of the figure until specified otherwise.

The kind of lattice described above is commonly used to analyze some analytic aspects of quantum integrable systems, see e.g. Ref. [13]. In the present context, it is a natural starting point for the explanation of the Peres method. To continue, we introduce a perturbation H' to the integrable Hamiltonian H_0 , which yields a *nonintegrable* Hamiltonian

$$H = H_0 + \lambda H', \quad (1)$$

with λ standing for a real number measuring the strength of the perturbation. Obviously, I does not commute with H since $[H', I] \neq 0$ in general, hence I is not any more an integral of motions. Consequently, the Hamiltonian eigenstates $|\psi_i\rangle$ are characterized by energies E_i , but not by fixed values I_i of observable I . If we want to continue with the 2D visualization of the spectrum as introduced above for $\lambda = 0$, the question raises what to draw on the vertical axis instead of I_i ? Quite naturally, Peres has chosen the expectation values $\langle I \rangle_i = \langle \psi_i | I | \psi_i \rangle$ of observable I in individual eigenstates. This choice smoothly connects the perturbed ($\lambda \neq 0$) and the unperturbed ($\lambda = 0$) cases since $\langle I \rangle_i \rightarrow I_i$ for $\lambda \rightarrow 0$.

Such lattices are shown in panels (b)–(e) of Fig. 1 (left), where the general parameter λ from Eq. (1) is replaced by the model-specific parameter B , see Sec. III. As can be seen in panels (b)–(d), adding a small perturbation to the integrable Hamiltonian does not instantaneously break down the entire regular lattice. Instead, some localized seeds of distortion are created, while the rest of the lattice remains ordered in the same fashion as in the

integrable case. This scenario is in accordance with Percival's conjecture [14] assuming that the sets of regular and chaotic eigenstates are statistically independent in the semiclassical limit $\hbar \rightarrow 0$, i.e. they do not interact with each other. Therefore, the persisting regular parts of the lattice can be associated with surviving remnants of classical tori, while the disordered parts correspond to proliferating chaotic orbits.

As the perturbation strength λ grows, the remnants of tori are gradually disappearing and disorder tends to increasingly plague the lattice. This is demonstrated by an almost totally disordered lattice in panel (e) of Fig. 1, where only a few low lying states keeps the regular pattern.

The above-outlined visual method implies a great heuristic gain. It allows one to judge which parts of a mixed spectrum (or, in optimal cases, which individual states) are regular and which are chaotic. Let us stress that this is opposite to traditional methods of quantum chaos based on the spectral statistics since in that case regular and chaotic (or mixed) parts of the spectrum can only be specified by energy. In the present approach, these parts can coexist within the same energy interval, the additional information needed for their separation being obtained from the behavior of the averages $\langle I \rangle_i$.

In practice, there certainly exist severe limitations in the ability to distinguish from each other the regular and chaotic patterns in a finite lattice. The identification of these patterns is further obscured by the fact that they may be superimposed on each other (as shown below). It should be stressed that the Peres' method is *not* quantitative—it does not yield (at least not directly) a calculable measure of quantum chaos which could be compared with other measures like, e.g., the Brody parameter.

In spite of these limitations, however, the method has a great potential to disclose important features of the mechanisms governing the breakdown of integrability and rise of chaos in low-dimensional systems. Its great advantage is that the structural information on individual eigenstates is represented by a single variable (the average of a suitably chosen observable), which allows one to use a simple visualization technique incorporating simultaneously a large number of states. Note that in higher than 2D cases, the spectral lattice would have to be drawn in a multidimensional space, which would require to develop a sophisticated computer software for pattern recognition. Here, as we only deal with two-dimensional systems, the most efficient software is that already built in the human brain.

Peres originally introduced his method in a more general way. He started from the simple fact that the time average of an arbitrary classical observable is a trivial integral of motion (similarly as any function in the phase space which assigns a constant value to all points of the same trajectory). This makes it possible, for an arbitrary system, to create an unlimited number of integrals of motion. Of course, this does not alter the fact that

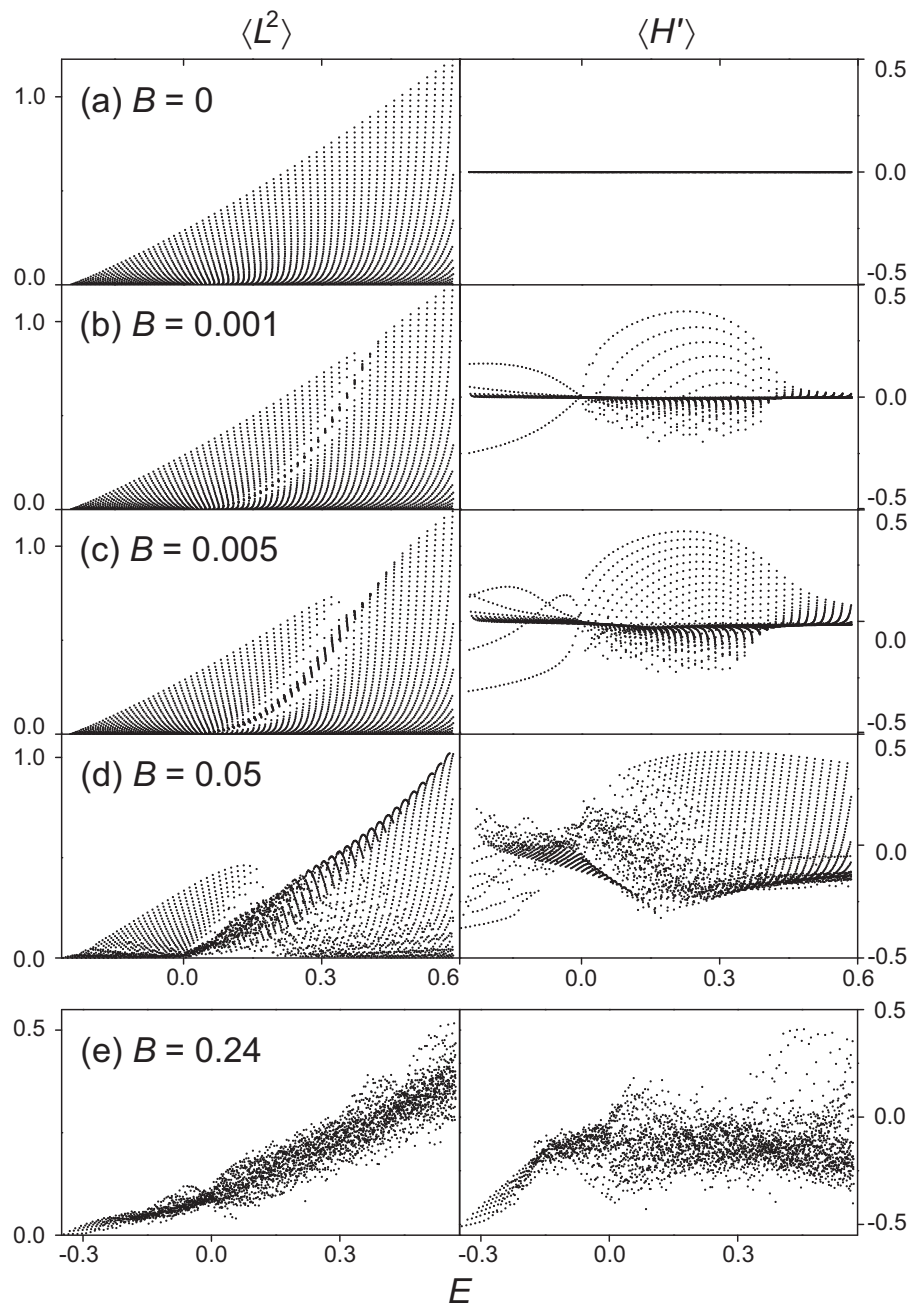


FIG. 1: Peres lattices for $J = 0$ eigenstates of the geometric collective model in the “2D even” quantization (see Sec. III). The points represent individual eigenstates with coordinates E_i (energy) and $\langle P \rangle_i$ (expectation value of the respective Peres operator). Two Peres operators, L^2 and H' , are employed, the results shown in the left and right columns, respectively. Row (a) corresponds to the fully integrable case, $B = 0$. Rows (b)–(d) depict the disturbance of the lattice with gradually increasing nonintegrable perturbation until reaching the most chaotic case, $B = 0.24$ (e). All quantities are given in relative units, $\hbar = 5 \cdot 10^{-3}$.

the system is nonintegrable, in general. Indeed, the functions corresponding to the new integrals are singular in the chaotic part of the phase space, hence they do not generally allow one to construct a transformation to the action-angle variables. Nevertheless, the dependence of time averages represents an interesting probe into the system’s dynamics at given energy.

The time averaging can be applied in quantum mechanics, as well. Let us take an arbitrary Hermitian operator P , which in the present context will be called Peres operator. One can construct an operator \bar{P} associated with the time average of quantity P . This operator has the property that the time-averaged expectation value $\langle P \rangle_{|\psi(0)\rangle} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \langle \psi(t) | P | \psi(t) \rangle dt$ for

an arbitrary initial state $|\psi(0)\rangle$ can be calculated as $\langle P \rangle_{|\psi(0)\rangle} = \langle \psi(0) | \bar{P} | \psi(0) \rangle$. The operator \bar{P} is readily obtained from the Heisenberg image $P_H(t)$ of P through

$$\bar{P} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T P_H(t) dt. \quad (2)$$

It is now straightforward to see that \bar{P} fulfills the commutation relations $[H, \bar{P}] = 0$, hence is an integral of motion.

Peres showed that in an integrable system the set of points E_i versus \bar{P}_i (where \bar{P}_i is a fixed value of \bar{P} in the i th eigenstate) forms a smoothly deformed regular lattice. This is so irrespective of the choice of the operator P used for evaluating the averages. Even if we choose an observable P which is *not* an integral of motion, $P \neq I$, the corresponding lattice for an integrable system will be ordered. The proof makes use of the EBK quantization and the fact that in an integrable system any additional integral of motion (including \bar{P}) must be a function of the actions (for an integrable system, \bar{P} is constant on the phase-space tori). Therefore, any distortion of regularity of the lattice signals the onset of chaotic motions.

The expressions \bar{P}_i and $\langle P \rangle_i$ yield the same values and can be interchanged. We call these values P -averages, while the set of points E_i versus $\langle P \rangle_i$ for an arbitrary (integrable or nonintegrable) Hamiltonian is denoted here as the Peres lattice. Note that in Refs.[7, 9], a more pictorial term “quantum web” was proposed.

We want to stress that there is no restriction in the choice of the Peres operator P . Different choices give different lattices, but the separation of levels into regular and chaotic parts of the lattice is independent of the choice. This consequence of the Percival conjecture will be discussed below. It is illustrated in Fig. 1, where the right-hand column shows lattices for another Peres operator than that used in the left-hand column. The rows correspond to the same values of the perturbation strength. We observe that the overall degree of chaos in each adjacent pair of images is about the same. Moreover, it can be shown (cf. Fig. 2) that the states allocated in the regular (chaotic) part of one lattice lie in the regular (chaotic) part of the other lattice, as well. [Note that illusive differences in the numbers of points on both sides of Fig. 1 (and some of the forthcoming figures) are caused by eventual accumulation of multiple points with very close coordinates.]

III. HAMILTONIAN AND PERES OPERATORS

In this section we briefly introduce the Hamiltonian of the Geometric Collective Model (GCM) of atomic nuclei [2] in a nonrotating regime and suitable Peres operators. The model has been discussed in Part I [1]. The GCM Hamiltonian $H = H_0 + BH'$ consists of the integrable part

$$H_0 = T - \beta^2 + \beta^4 \quad (3)$$

and a nonintegrable perturbation

$$H' = \beta^3 \cos 3\gamma, \quad (4)$$

where polar coordinates β and γ stand for dynamical variables (shape parameters) and T is the kinetic energy, which involves the associated momenta [1]. The corresponding Cartesian coordinates read as $(x, y) = (\beta \cos \gamma, \beta \sin \gamma)$, with the momenta transformed accordingly. Parameter B is the perturbation strength, a model-specific version of the above-introduced general variable λ . This choice corresponds to the GCM potential $V = A\beta^2 + B\beta^3 \cos 3\gamma + C\beta^4$ [1] with $(A, C) = (-1, +1)$. As C is positive, the Hamiltonian for any energy E describes motions confined within a finite domain of β . The three degenerate global minima of the potential V are located at $\beta > 0$, $\gamma = \frac{\pi}{3}$ or 0 (for $B > 0$ or < 0 , respectively), and a single local maximum is at $\beta = 0$. As in Part I, all quantities are considered dimensionless.

We take into account two different and physically relevant quantization schemes, which are connected with two- and five-dimensional versions of the system (hereafter referred to as 2D and 5D cases, respectively) [1]. The kinetic term T is different for both schemes, nevertheless in both cases it is proportional to the squared Planck constant over $2K$, where K stands for an effective mass parameter of the system. The fraction $\kappa = \hbar^2/K$ is called the classicality parameter. The value of this parameter adjusts the absolute density of quantum spectra. In the following we set $K = 1$ and vary the value of \hbar . The diagonalization of the Hamiltonian is performed in the appropriate 2D or 5D harmonic oscillator bases. The 2D case is further split to even and odd case, referring to the symmetry or antisymmetry with respect to the $\gamma \rightarrow -\gamma$ inversion.

A set of eigenenergies and eigenvectors is obtained, for which the Peres lattice is constructed. We consider two types of the Peres operator. The first one is identified with the square of the angular momentum operator L connected with the rotations varying angle γ . In the 2D case, this is the Casimir invariant of the $O(2)$ algebra of rotations in the (β, γ) plane:

$$L_{2D}^2 = \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \rightsquigarrow \hbar^2 m^2, \quad m = 0, 3, 6, \dots, \quad (5)$$

cf. Eq. (7) of Ref. [1]. Note that the L_{2D}^2 eigenvalues, indicated in the last equation, involve multiples of 3 due to the required symmetry of the eigenfunctions with respect to rotations about angle $2\pi/3$ [1]. In the 5D case, L^2 is the Casimir invariant of the GCM algebra $O(5)$ [15] restricted to value $J = 0$ of the $O(3)$ angular momentum (null rotations in the ordinary space). We have

$$L_{5D}^2 = \frac{\hbar^2}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \rightsquigarrow \hbar^2 v(v+3), \quad (6)$$

$$v = 0, 3, 6, \dots,$$

cf. Eq. (5) of Ref. [1]. The eigenvalues of this operator are enumerated by an integer v (in the nuclear context

called seniority), which for $J = 0$ again has only the values equal to multiples of 3 [15].

For the Hamiltonian eigenstates, L_{2D}^2 and L_{5D}^2 take the values from Eqs. (5) and (6), respectively, only for $B = 0$, in which case the L^2 operators commute with the Hamiltonian. For $B \neq 0$, the energy eigenstates $\Psi_i(\beta, \gamma)$ are mixtures of states with different values of m or v . In any case, the average $\langle L^2 \rangle_i$ quantifies oscillations of the wave functions Ψ_i in the direction of angle γ (examples shown below).

The second Peres operator used in our analysis is identified with the perturbation H' from Eq. (4). It is worth noting that the expectation value of H' in an eigenstate $|\psi_i\rangle$ of the general Hamiltonian (1) coincides with the derivative $dE_i/d\lambda$ of the i th energy level at the given value of the control parameter. In the present case, the angular part of the H_0 eigenstates has the property that $\langle \cos 3\gamma \rangle_i = 0$, hence

$$\langle H' \rangle_i \Big|_{B=0} = \frac{dE_i}{dB} \Big|_{B=0} = 0 \quad (7)$$

(see the upper right panel of Fig. 1). The vanishing slope at $B = 0$ is consistent with the symmetry of the spectrum $E_i(B)$ under the reflection $B \mapsto -B$. If $B \neq 0$, however, the average is generally nonzero and satisfies $\langle H' \rangle_i = (E_i - \langle H_0 \rangle_i)/B$. The disturbances in the $P = H'$ lattice therefore show up as departures of individual points from the line $\langle H' \rangle_i = 0$, as seen in the right-hand column of Fig. 1. This facilitates the visual inspection of results.

IV. RESULTS AND DISCUSSION

A. Comparison of Peres lattices

The effects accompanying the decay of regularity in Peres lattices were discussed from a general viewpoint in Sec. II. Figure 1, which corresponds to the GCM in the 2D even quantization with the above two choices of the Peres operator, illustrates the gradual transition from ordered to disordered lattices. Note that the case $B = 0.24$ depicted in row (e) corresponds to the minimum of the classical regular fraction f_{reg} , see Part I [1]. The gradual onset of chaos in these lattices will be analyzed in more details in Sec. IV C.

In Fig. 2 we compare Peres lattices obtained (for both Peres operators) in the 2D even and 5D quantizations. The value $B = 0.62$ belongs to the island of strongly pronounced regularity close to the resonance of β and γ vibrations, see Sec. IV D. The regularity shows up as a large area of ordered points, which starts at the lowest negative energies and spreads over to positive energies, where it is joined by a rising chaotic area. Despite the spectra for different quantizations show significant differences [1], the form of Peres lattices is rather similar.

In order to demonstrate the coincidence of the regular and chaotic regions in the lattices for different Peres operators, we have highlighted three of the states in the first

row of Fig. 2, marking them by a square, a bullet, and a diamond. Probability densities for the corresponding wave functions are depicted in Fig. 3. The wave functions as well as the location of the respective points in the Peres lattice show that the square and the diamond correspond to regular states, while the bullet represents a chaotic state. In Fig. 2(a) we see that this assignment is consistent for both choices of the Peres operator. Let us note that both regular levels (a) and (c) in Fig. 3 exhibit a large increase of the wave-function magnitude in a region where a certain periodic trajectory oscillates in the classical case [16].

Although, as emphasized above, we can choose an arbitrary operator for plotting the Peres lattice, Fig. 2 indicates that some operators may be more suitable than others. For some choices, a part of the regular region in the lattice can pervade into the chaotic area and hide there behind a disordered mesh of points. In such cases, one cannot decide whether a level inside a chaotic region is indeed chaotic. (On the other hand, overlapping regular areas form a regular area again.) While there is no doubt that these observations demonstrate limitations of the Peres method, one can improve its resolution by employing several incompatible Peres operators. Indeed, Fig. 2 (right) shows that for the three highlighted states a better choice of Peres operator is $P = H'$.

Figure 4 displays Peres lattices for 2D even quantization with different classicality constant κ . In Part I, we have shown that by tuning the value of κ one scales the absolute density of quantum states but does not affect statistical properties of the spectra. Here we want to show that these changes do not influence the main features of the Peres lattice. The variations of the lattice with $\kappa = 4, 25, 100 \cdot 10^{-4}$ for both Peres operators are observed in rows (a)–(c) of Fig. 4. Note that $B = 1.09$ is a value of the control parameter for which the system exhibits very rich structures with well pronounced minima and maxima of the dependence classical regular fraction f_{reg} on energy (see the insets). A decrease of the κ value increases the density of states (the system gets closer to the classical limit) and serves as a zoom into the sea of levels: one can see finer details of the lattice but (because of computational limits) a smaller fraction of the spectrum is available. For a comparison, the box in all panels of the same column encloses a fixed region of energy \times P-average. It is seen that the structures observed in the lattice become wealthier in details as κ decreases, but the overall appearance of the relevant part of the lattice remains the same.

B. Links to classical dynamics

In Part I, we investigated the connection between the classical measure of regularity f_{reg} (the fraction of the regular phase-space volume) and the quantum measure represented by $(1 - \omega)$, where ω stands for the Brody parameter. Our conclusion was that both measures entail

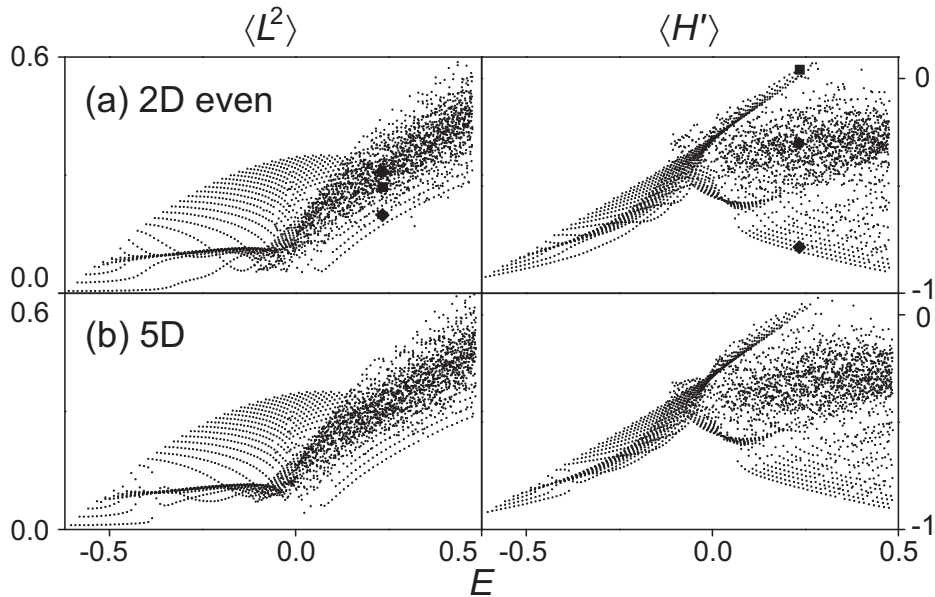


FIG. 2: Peres lattices of the GCM at $B = 0.62$ with averages of L^2 (left) and H' (right) for 2D even (row a) and 5D (row b) quantizations ($\hbar = 5 \cdot 10^{-3}$). In row (a), three states denoted by full symbols are identified in both lattices, demonstrating that the assignment of a given state to a regular or chaotic part of the lattice does not depend on the choice of the Peres operator.

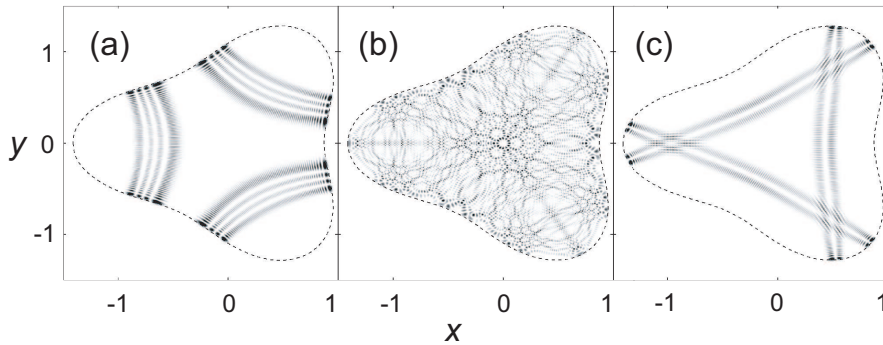


FIG. 3: Squared wave functions for the three marked states from Fig. 2 (2D even quantization). The states (a) and (c), which correspond to the square and the diamond, respectively, are taken from the regular part of the lattice (the 1995th and 1885th level, respectively) and exhibit well pronounced quantum scar effects. The state (b), associated with the bullet, belongs to the chaotic part (the 1890th level) and shows an ergodic behavior.

qualitatively the same energy-dependent behavior, irrespective of the method of quantization. In the present context, new questions appear, namely: How strong is the correspondence between the behavior of f_{reg} and the character of Peres lattices? Or more specifically, is there a correlation between ordered (disordered) parts of the lattice and regular (chaotic) parts of the phase space?

In order to find an answer we plot figures showing the dependence $f_{\text{reg}}(E)$ in the insets of Fig. 4. Pure visual inspection discloses strong correlations between the increase of f_{reg} and the occurrence of regular domains in Peres lattices for both operators $\langle L^2 \rangle$ and $\langle H' \rangle$.

Following the dependence in row (a) of Fig. 4 we find $f_{\text{reg}} = 1$ for negative energies and observe fully regular patterns in the corresponding part of both lattices. This

is the domain where the quadratic-well approximation of the GCM potential is valid. Note that the regular pattern at low energies is present in Peres lattices for all values of parameter B . At energies just below $E = 0$ the classical regularity begins to drop (forming a small fold at $E \approx 0$), which is manifested in the lattice of $\langle L^2 \rangle$ by a band of disordered points with a small tail penetrating to the regular area at zero energy. Passing through the totally chaotic area with $f_{\text{reg}} = 0$ at $1 \lesssim E \lesssim 3$, the regularity begins to rise again. This is accompanied by a formation of a new regular pattern in the lattices at large values of $\langle L^2 \rangle$ or small values of $\langle H' \rangle$.

One can switch to rows (b) and (c) of Fig. 4 and continue in the same manner. A remarkable phenomenon appears at $E \approx 35$, where f_{reg} reaches for a while the

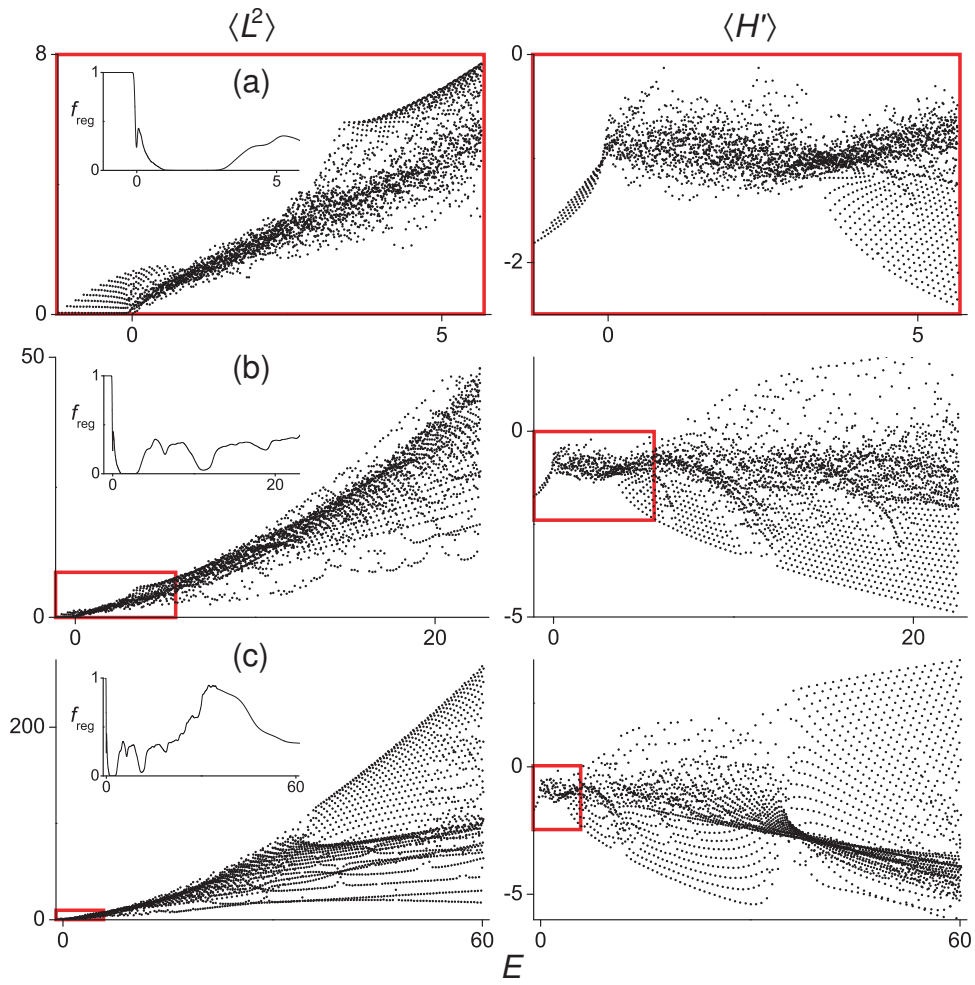


FIG. 4: The GCM Peres lattices for $B = 1.09$ and different values of the Planck constant: $\hbar = 0.02$ (a), 0.05 (b), and 0.1 (c). The 2D even quantization was employed with the same Peres operators as in the previous figures. Lower values of κ yield denser spectra, which can therefore be evaluated only in narrower energy intervals (numerical limitations). The box (red online) encloses the same area in the three panels of each column. Insets show the dependence of the classical regular fraction f_{reg} on energy (see Part I [1]) for the energy domain displayed in each row. One can observe that the f_{reg} dependences are correlated with ordered and disordered areas in the corresponding lattices in both columns.

value of full regularity. This somewhat surprising behavior was discovered in Ref. [3]. Here we may trace the signatures of regularity in the two Peres lattices. For instance, the lattice in the lower right panel gets locally contracted to a narrow interval of $\langle H' \rangle$ and develops a highly organized pattern for $E > 35$. Distortions of this pattern start appearing at energies $E \gtrsim 50$, where the classical regularity is decreasing again. Let us note that for energies much above the range shown in Fig. 4, the order increases to the asymptotic value $f_{\text{reg}} \rightarrow 1$ for all values of parameter B . This is due to the β^4 term of the potential which becomes increasingly important at high energies, generating predominantly regular dynamics.

As explained in Sec. II, Peres invariants can be introduced on both classical and quantum levels. One can determine the classical analogue of the Peres operator P and calculate its average $\langle P \rangle_c$ over an arbitrary trajec-

tory. In this way, a function in the classical phase space can be constructed for any Peres invariant. In the right-hand panel of Fig. 5, the function $\langle L^2 \rangle_c$ is shown (coded in shades of gray) for a certain values of the control parameter and energy on the $y = 0$ section of the phase space. Remind that (x, y) represent Cartesian counterparts of the polar coordinates (β, γ) , while (p_x, p_y) are the corresponding momenta, and that there is no difference between 2D and 5D cases on the classical level [1].

On the left-hand side of Fig. 5, the standard Poincaré section is plotted for 100 crossing trajectories. We observe that the chaotic area identified in the Poincaré section is covered by one shade of gray in the map of $\langle L^2 \rangle_c$. This follows from the ergodicity of chaotic motions, which ensures that any vicinity of each point in a chaotic phase-space domain is visited by a single trajectory. Therefore, almost the whole domain yields a single value of the clas-

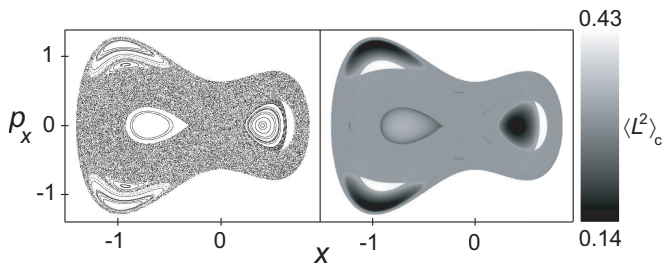


FIG. 5: The $y = 0$ section of the classical phase space (coordinate x versus momentum p_x) for $B = 0.62$ and $E = 0.2$. Left: Poincaré section formed by crossings of 10^2 randomly chosen trajectories with the plane of the section (10^3 crossings for each trajectory). Right: Density plot of the Peres invariant $\langle L^2 \rangle_c$ calculated classically across the section (on a mesh of 500×500 points). Dark and light regions (low and high values of the Peres invariant, respectively) contain regular trajectories (see the left panel) and simultaneously correspond to regular domains in the Peres lattice [see Fig. 2 (a) at $E \approx 0.2$, where the regular domains are located at the lower and upper sides of the lattice].

sical Peres invariant (with exceptions including periodic orbits that however fill only a zero-measure subset of the phase space). On the other hand, in the regular islands of the Poincaré section the shade of the $\langle L^2 \rangle_c$ image gradually changes.

The corresponding Peres lattice was shown in Fig. 2 (a), with squared wave functions of the selected states depicted in Fig. 3. The agreement with classical results in Fig. 5 is remarkable. The trajectory responsible for the “scar” of the wave function in Fig. 3 (a) passes the central regular part of the phase-space section in Fig. 5 close to $(x, p_x) = (-0.8, 0)$, yielding a medium value of $\langle L^2 \rangle_c$. Indeed, the respective state (denoted by the square) is localized in the medium part of the $\langle L^2 \rangle_c$ Peres lattice. The trajectory contributing to the wave function in Fig. 3 (c) falls to the dark regular regions of the density plot in Fig. 5, which again corresponds to the value of $\langle L^2 \rangle_c$ for the respective point (the diamond). A comparison of Figs. 5 and 2 (a) indicates an excellent correspondence between the results based on the Poincaré and Peres methods (if the latter one is supplemented by a classical calculation as in the right-hand panel of Fig. 5).

C. Decay of regularity

We return now to Fig. 1 in order to discuss in more detail the mechanism of the transition from the integrable dynamics at $B = 0$ to the chaotic $B > 0$ regime. As pointed out above, in the integrable case (row a) the quantity L^2 is an integral of motion and $\langle H' \rangle$ is identically zero.

Let us look at the curved chains of points apparent in panel (a) of Fig. 1 (left). These chains, which begin at $\langle L^2 \rangle = 0$ and lead upwards, connect states with a con-

stant sum $N = n_\beta + m_\gamma$, where n_β is the radial quantum number and $m = 3m_\gamma$ represents the angular-momentum quantum number (the latter increases towards the upper end of the chain). If the perturbation is turned on, some of the points within the same chain start moving against each other, forming a kind of “condensation centers”; see the left panels (b) and (c). A detailed inspection discloses that the most affected levels lie in the short stretches of the chains which are nearly parallel with the vertical axis. In other words, the perturbation is most efficient for the states which are very close in energy and in the value of $\langle L^2 \rangle$. Indeed, exploiting the perturbation theory, we can say that if the perturbation matrix element is nonzero (at $B = 0$, the operator H' couples only the states differing in m_γ by ± 1), the proximity of levels leads to an increased mixing. This in the present case shows up as an attraction to a common value of $\langle L^2 \rangle$ for the whole bunch. For $B = 0$ the vertical stretches are developed in the chains located within the energy interval $0 \lesssim E \lesssim 0.4$ and, consequently, the corresponding levels in these chains are most vulnerable if B starts to increase. This is why small perturbations affect first only a very limited part of the lattice, as observed in panels (b) and (c).

If we continue increasing the perturbation, more and more levels become influenced by the interaction. For sufficiently large values of B , the levels start interacting between neighboring chains and the whole structure gradually breaks down, see Fig. 1 (d). For $B = 0.24$ (panel e) the lattice is totally disintegrated. We have just reached the most chaotic parameter region, where only the deepest levels form a regular lattice due to the validity of the quadratic-well approximation.

The size of the perturbation can be quantified with the aid of the other Peres operator, i.e. by the value of $\langle H' \rangle$, which is displayed in the right-hand column of Fig. 1. Rows (b) and (c) help to discover that not only the levels with $E > 0$, but also also a few of those with $E < 0$ become disturbed by a small perturbation (this was not visible in the left-hand panels). For $E > 0$, we observe several regular arcs of points at $\langle H' \rangle > 0$ and some more disordered points with $\langle H' \rangle < 0$. Both these groups of points correspond to the “condensation centers” apparent in the left-hand panel. The $\langle H' \rangle > 0$ part of the lattice contains states with $\langle \cos 3\gamma \rangle_i > 0$, hence γ centered around values $0, \frac{2\pi}{3}$ and $\frac{4\pi}{3}$ (saddle points of the potential). On the other hand, the $\langle H' \rangle < 0$ part collects states with $\langle \cos 3\gamma \rangle_i < 0$, hence $\gamma \sim \frac{\pi}{3}, \pi, \frac{5\pi}{3}$ (global minima of the potential). Examples of both these types of wave functions will be given later in Fig. 6. It is somewhat surprising that the more regular part of the lattice is connected with the states localized in the saddle-point regions, whereas the states localized around the minima seem to be more chaotic.

For moderate perturbation strengths, great majority of points in Fig. 1 (right) remains located at $\langle H' \rangle = 0$, indicating the absence of structural changes. These points correspond to the unperturbed parts of the lattice in the

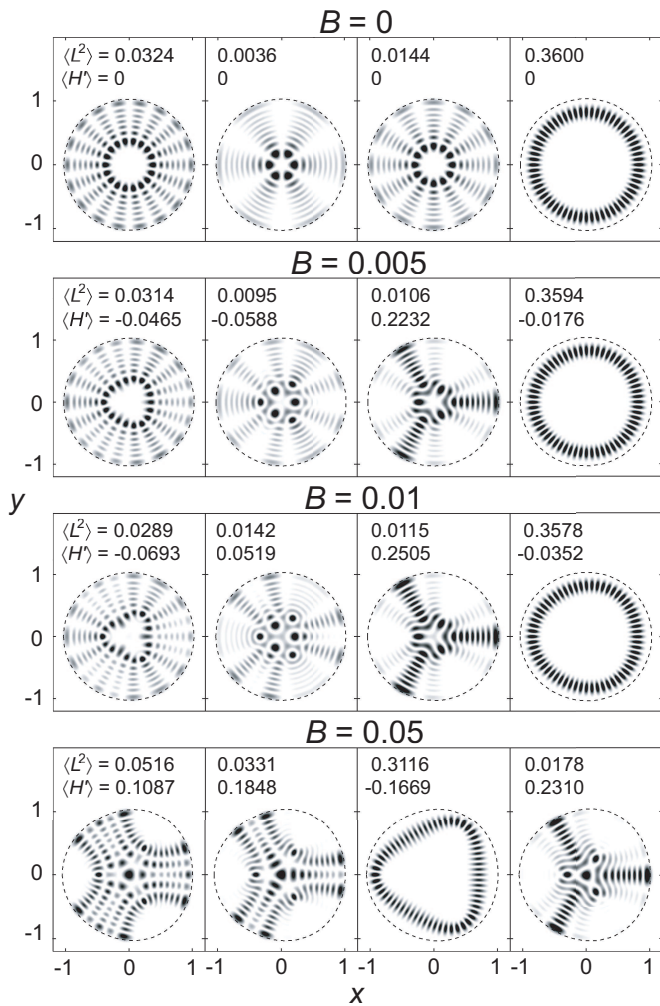


FIG. 6: Squared wave functions of four successive eigenstates (states no. $i = 52, \dots, 55$ at E from 0.059 to 0.076) of the integrable $B = 0$ Hamiltonian (for $\hbar = 0.02$) in the 2D even quantization (the first row) and the same states for $B = 0.005$, 0.01, and 0.05 (the second, third, and fourth rows, respectively). The respective values of both P-averages are given in each panel. The first three states (arranged in columns) are more sensitive to the perturbation than the fourth one, in accord with the lattices in Fig. 1 (see the text).

left-hand column. As B increases, however, both positive and negative halves of the $\langle H' \rangle$ lattice become increasingly populated and finally the negative (irregular) part captivates absolute majority of points (row e). This agrees with the disordered form of the lattice in the left-hand column.

The changes of the Hamiltonian eigenstates accompanying the above-described evolution of the Peres lattices are illustrated in Fig. 6. Its first row presents four unperturbed ($B = 0$) wave functions (probability distributions in the 2D even quantization), while the second, third, and fourth rows demonstrate the effects of perturbation (for $B = 0.005$, 0.01 and 0.05, respectively) on the same states. The states correspond to four successive en-

ergy levels, the associated values of both P-averages being given in each case. Note that the value of κ was chosen differently than above, so the states cannot be directly marked in Fig. 1.

The rightmost column of Fig. 6 represents a state which is originally far away from the condensation centers in Fig. 1 (left). Indeed, this state resists the smaller perturbation rather well. On the other hand, the most pronounced structural changes at $B = 0.005$ and 0.01 are observed for the states in the first three columns of Fig. 6. The states in the middle two columns belong directly to the condensation center of strongly interacting levels and the state in the leftmost column is close to it. One clearly observes the breakdown of the rotational symmetry and a gradual crossover to a trifoliate form of the wave functions, particularly for the two states in the middle. While the states with $\langle H' \rangle < 0$ are localized more around the minima of the potential, the ones with $\langle H' \rangle > 0$ dwell more in the saddle-point regions. In the fourth row of Fig. 6, which corresponds to the irregular lattice at $B = 0.05$, cf. Fig. 1 (c), all four states are already perturbed. We observe that the form of the rightmost state has been transmitted to the third state in the last row and vice versa, as results from an avoided crossing of both levels.

Finally, it is instructive to look also at the changes of classical Peres invariants with parameter B . We have calculated the lower and upper bounds of the classical average $\langle L^2 \rangle_c$ and show the results for $E = 0$ in Fig. 7. As we see, the interval of $\langle L^2 \rangle_c$ is contracted almost to a single value in the most chaotic case, $B = 0.24$, where the ergodicity is maximal. Surprisingly, even the small remnants of tori present there have the same value of $\langle L^2 \rangle_c$. If we step over the most chaotic point, several new tori with higher values of $\langle L^2 \rangle$ appear, which results in a widening of the interval between the bounds. Note that the narrow “neck” in $\langle L^2 \rangle$ at $E = 0$ can also be observed in the quantum Peres lattice in Fig. 1 (e).

D. A quasiregular region

Looking at the form of $\langle L^2 \rangle$ and $\langle H' \rangle$ lattices in row (e) of Fig. 1, one can notice two characteristic features: (i) The centroid value of $\langle L^2 \rangle$ exhibits roughly a linear increase with energy E . (ii) The lattice for $\langle H' \rangle$ grows linearly only at low energies, while for higher energies it scatters around a roughly constant average. These types of dependences in both lattices are qualitatively understandable and remain approximately valid for all increasingly high values of parameter B . Nevertheless, the distribution of regular and irregular parts within the lattices of the above forms exhibits a high degree of variability.

At the first sight, one could expect that the increase of the perturbation strength in the GCM Hamiltonian from $|B| = 0$ to $|B| > 0$ should lead to a monotonous progression of disorder, as described in the preceding subsection.

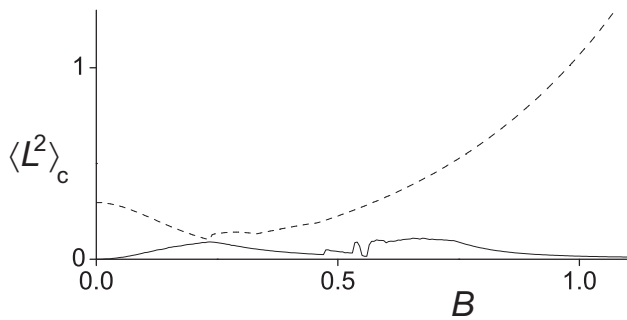


FIG. 7: The lower and higher bounds (solid and dashed lines, respectively) of the classical Peres average $\langle L^2 \rangle_c$ for $E = 0$. The bounds almost touch each other at $B = 0.24$, where the most chaotic region is located. Fluctuations of the lower bound near $E = 0.5$ are caused by the appearance and disappearance of small unstable tori.

Although this scenario is typical for many related systems of type (1), see e.g. Refs. [17, 18], it does not apply in the present case.

The GCM is peculiar in two respects. First, as shown in Ref. [3], the classical regular fraction f_{reg} for negative energies converges to unity for asymptotically large values of B , when the GCM Hamiltonian can be rescaled to the form $H_\infty \equiv T + \beta^4 + \beta^3 \cos 3\gamma$. Let us stress that the type of order observed for $E < 0$ in the $B \rightarrow \infty$ limit is totally different from the $B = 0$ case and that in the asymptotic limit the regularity fades away at positive energies. Second, the competition between regular and chaotic dynamical modes gets surprisingly complex at medium values of $|B|$. The most important change in this range takes place around $B \approx 0.6$, where extensive regular patterns are established in the Peres lattices at both low and medium energies, see Fig. 2. (Note that the ordered dynamics at very high energies is connected with the dominance of the β^4 term of the potential [3].)

The $B \approx 0.6$ quasiregular region was briefly mentioned already in Part I [1]. As shown in Ref. [19], it is closely related to a so-called ‘‘arc of regularity’’ observed [20] in the parameter space of the interacting boson model (IBM) [21]. Although the IBM is a more sophisticated model of nuclear collectivity than the GCM, it makes use of a similar language (involving quadrupole degrees of freedom) and yields comparable results. Since its discovery, the IBM arc of regularity has been subject to several analyses [19, 20, 22, 23]. Some interesting hints have been disclosed, but many questions remained open.

In the GCM case, we observe a phenomenon very similar to the IBM arc. A comparison of Figs. 1 (e) and 2 (a) provides a clear evidence for a large increase of regularity between the two values of B . In fact, the pattern of ordered points, which dominates in the low-energy part of the lattice at $B \approx 0.6$, starts rising already before the maximum of regularity is reached and persists long after

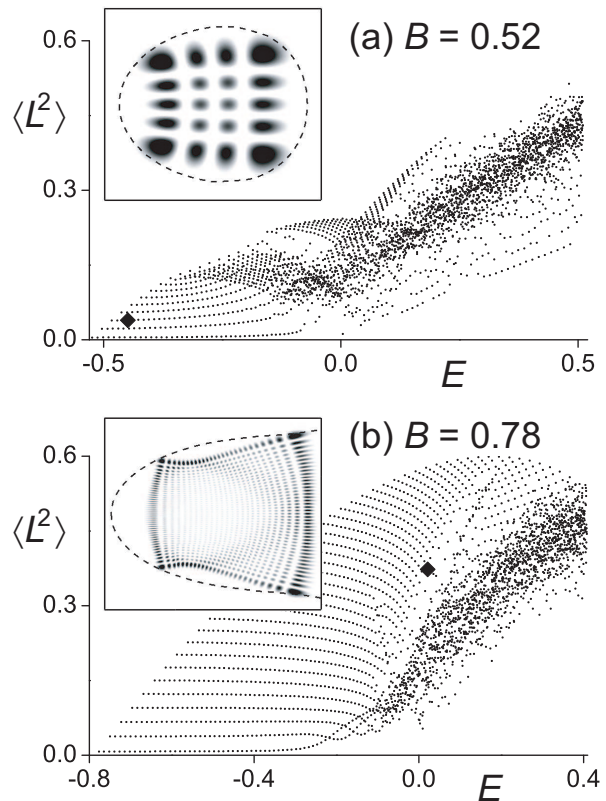


FIG. 8: Peres lattice for $\langle L^2 \rangle$ in 2D even quantization ($\hbar = 5 \cdot 10^{-3}$) at $B = 0.52$ (a) and $B = 0.78$ (b). We see that the regular pattern is present before and after the main peak of regularity at $B = 0.62$, cf. Fig. 2 (a). Both panels contain the same number of states. The insets depict selected wave functions (diamonds in the respective lattices) demonstrating the presence of β and γ vibrations (only the sector around the minimum $\gamma = 4\pi/3$ is shown in both cases). The state in the upper panel ($i = 17$) is at $E = -0.449$, the lower one ($i = 1292$) at $E = 0.021$.

it is left. As an example, we show in Fig. 8 the $\langle L^2 \rangle$ lattices for $B = 0.52$ (panel a) and $B = 0.78$ (panel b). It is obvious that the low-energy parts of both lattices exhibit a great deal of similarity with Fig. 2 (a).

The mechanism behind the $E < 0$ pattern of ordered points visible in all $\langle L^2 \rangle$ lattices at medium and large values of $|B|$ is connected with a competition of two types of vibrations. To show this, we apply the quadratic-well approximation, valid for $|B| > 0$ at low energies above the potential minimum. It relies on the local use of a 2D oscillator potential

$$V \approx V_0 + \frac{k_\beta}{2} (\beta - \beta_0)^2 + \frac{k_\gamma}{2} \beta^2 (\gamma - \gamma_0)^2 \quad (8)$$

where β_0 and γ_0 stand for a position of the potential minimum, and $k_\beta = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial \beta^2} \right)_0$ and $k_\gamma = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial \gamma^2} \right)_0$ for the rigidity of the oscillator in β and γ directions.

It turns out that the horizontal chains of points with increasing energy, which can be observed in the lattices in Figs. 2 (a) and 8 (a,b), correspond to states with a growing number of β -vibration quanta n_β . The vertical arrangement of these chains, on the other hand, follows an increasing number of γ -vibration quanta n_γ . Such an interplay of vibrational modes in both β and γ directions represents the basic organization principle for the *low-energy* part of the $\langle L^2 \rangle$ lattices for $|B| > 0$. Remind that this is essentially different from the $B = 0$ situation, when the lattice was determined by vibrational modes in β and rotational modes in γ . An example of a $\beta \times \gamma$ vibrational state (its squared wave function) is shown in the inset of Fig. 8 (a).

A simple calculation shows that at $B = 2/3 \doteq 0.66$ one gets $k_\beta = k_\gamma = 12$. We encounter a resonance of the local oscillator frequencies in β and γ directions, which leads to an additional regularization of the lattice. Interestingly, due to mutual interactions between levels the degeneracy in a wide interval of energies becomes maximal already at $B = 0.62$, where the main peak of regularity takes place. The resonance is responsible for the “condensation” of the $\langle L^2 \rangle$ lattice at $E < 0$ along a nearly horizontal line of multiple points apparent in Fig. 2. Although in Fig. 1 a similar phenomenon was linked to initiating the first seeds of disorder, its role in the present case is rather opposite: it helps to clean up some disarranged parts of the lattice. Let us stress that the proximity of levels implies rapid structural changes with no immediate relation to chaos. It can indicate a crossover to chaos as well as emergence of order (imagine the scenario from Sec. IVC played in the reverse direction—with B decreasing to 0).

It needs to be stressed that at $B \approx 0.6$ the patterns emerging in the Peres lattice and in wave functions go far beyond the quadratic-well approximation. Indeed, as shown in Fig. 2, the ordered part of the lattice exceeds to *medium energies*, where the approximation deteriorates and even becomes completely invalid (this is certainly so at energy E_{sad} of a saddle point of the potential, where the three regions around the minima merge together and form a single connected area). Surprisingly, even at $E > 0 > E_{\text{sad}}$ a large fraction of states still keeps the form with well distinguished β and γ vibrations. This is exemplified by a selected wave function in the inset of Fig. 8 (b), where the vibrational pattern remains confined around the potential minimum despite the fact that the energetically accessible domain unifies all three sectors. Note that peculiar $\beta \times \gamma$ vibrational structures connecting all sectors can be found in even higher eigenstates, cf. Fig. 3 (c). One may therefore assume that the observed regular island at $B \approx 0.6$ is due to a fortunate coincidence of resonating β and γ modes in both $E < 0$ and $E \gtrsim 0$ domains.

Qualitatively the same explanation is valid also in the IBM. There, the degeneracy of β and γ vibrations was noticed empirically [23] and later supported by theoretical arguments [19]. A detailed analysis of the β and γ modes in the IBM framework is in preparation [24].

The present work provides an independent verification of this mechanism in the simpler GCM case. It also clearly manifests the influence (probably specific for the present form of potential) of the low-energy ordering of states on the spectrum at higher energies, which is significant for the large extension of the regular region.

V. CONCLUSIONS

In this paper, we have continued and exceeded the work presented in Part I [1], whose main purpose was to test the Bohigas conjecture for different quantization schemes under the condition of a strong variability of chaotic measures with energy. We have revitalized an almost 35 years old method by Peres [6] and showed its great potential in the field of quantum chaos and even beyond.

Peres lattices provide an excellent viewpoint to the landscape around the border between classical and quantum physics. This is so especially for systems with two degrees of freedom whose lattices can be drawn as two-dimensional diagrams, in analogy with planar Poincaré sections of such systems. If applied within the domain of quantum chaos, Peres’ method enables one to distinguish regular and chaotic behaviors on the level of individual states or subsets of states within the same energy interval. This is in contrast to traditional methods based on spectral statistics that assign the same degree of chaos to all levels within the same interval.

Quite naturally, there are some limitations of the method. As seen, regular and irregular parts of the lattice can in some cases be superimposed on each other, which hinders their correct resolution. In particular, the distinction of chaotic states may be ambiguous since a superposition of two or more regular patterns may seem irregular. Nevertheless, we showed that this problem can in principle be bypassed by constructing more lattices with different Peres operators. Their optimal choice, which unavoidably depends on the concrete system under consideration, should be subject to further study. Although the Peres’ method does not directly yield a calculable measure of quantum chaos, it represents an important indicator providing new insights into the origin of chaotic behavior.

However, our intention in this paper was to go even beyond the scope of quantum chaos, demonstrating that Peres lattices represent an extremely efficient and economic tool for studying significant features in large ensembles of eigenstates across the spectrum. Relevant properties of the wave functions can be read off from the expectation values of suitably chosen Peres operators. Instead of analyzing each individual eigenstate and its wave function, one may look at the associated Peres lattice where the desired information is contained in a synoptical way. As an example, we were able to closely follow the breakdown of integrability of the system and the rise of a new type of order. We believe that the

results presented here may encourage similar studies in other systems.

The present work completes our long-term effort to map chaotic properties of the geometric collective model of nuclear physics [1, 3]. A great advantage of the geometric model (and also of the related interacting boson model) is the apparent conceptual simplicity encoding strikingly rich complexity of dynamics. Let us note that the above simplified models capture the main phenomenological features of nuclear collectivity which are presently beside a fully microscopic description. The study of disordered collective dynamics within these models may be considered as an attack to the problem of chaos in many-body systems from the direction perpen-

dicular to the mean-field approach.

An interactive survey of our main results can be found at the website [25].

Acknowledgments

We would like to thank A. Frank, A. Leviatan, and M. Macek for inspiring discussions. This work was supported by Czech Science Foundation (grant no. 202/06/0363) and by the Czech Ministry of Education (contracts nos. 0021620859 and LA 314).

-
- [1] P. Stránský, P. Hruška, P. Cejnar, Phys. Rev. E **79**, 046202 (2009).
 - [2] A. Bohr, Dansk. Mat. Fys. Medd. **26**, 14 (1952); G. Gneuss, U. Mosel, W. Greiner, Phys. Lett. B **30**, 397 (1969).
 - [3] P. Cejnar, P. Stránský, Phys. Rev. Lett. **93**, 102502 (2004); P. Stránský, M. Kurian, P. Cejnar, Phys. Rev. C **74**, 014306 (2006).
 - [4] O. Bohigas, M.J. Giannoni, C. Schmit, Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984).
 - [5] M.L. Mehta, *Random Matrices* (Academic Press, San Diego, 1991).
 - [6] A. Peres, Phys. Rev. Lett. **53**, 1711 (1984).
 - [7] L.E. Reichl, *The Transition to Chaos* (Springer, New York, 1992).
 - [8] N. Srivastava, C. Kaufman, G. Müller, J. Appl. Phys. **67**, 5627 (1990); N. Srivastava, G. Müller, Z. Phys. B **80**, 137 (1990).
 - [9] S. Ree, L.E. Reichl, Phys. Rev. E **60**, 1607 (1999).
 - [10] A. Peres, Phys. Rev. A **30**, 1610 (1984).
 - [11] T. Gorin, T. Prosen, T.H. Seligman, M. Žnidarič, Phys. Rep. **435**, 33 (2006).
 - [12] A. Einstein, Vehr. Dtsch. Phys. Ges. **19**, 82 (1917); L. Brillouin, J. Phys. Radium **7**, 353 (1926); J. B. Keller, Ann. Phys. (N.Y.) **4**, 180 (1958).
 - [13] K. Efsthathiou, M. Joyeux, D.A. Sadovskii, Phys. Rev. A **69**, 032504 (2004).
 - [14] I. C. Percival, J. Phys. B **6**, L229 (1973).
 - [15] E. Chacón, M. Moshinsky, J. Math. Phys. **18**, 870 (1976).
 - [16] H.-J. Stöckmann, *Quantum Chaos. An Introduction* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1999).
 - [17] E. Haller, H. Köppel, L. S. Cederbaum, Phys. Rev. Lett. **52**, 1665 (1984).
 - [18] T.H. Seligman, J.J.M. Verbaarschot, M.R. Zirnbauer, Phys. Rev. Lett. **53**, 215 (1984).
 - [19] M. Macek, P. Stránský, P. Cejnar, S. Heinze, J. Jolie, J. Dobeš, Phys. Rev. C **75** 064318 (2007).
 - [20] Y. Alhassid, N. Whelan, Phys. Rev. Lett. **67**, 816 (1991); N. Whelan, Y. Alhassid, Nucl. Phys. **A556**, 42 (1993).
 - [21] F. Iachello, A. Arima, *The Interacting Boson Model* (Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 1987).
 - [22] P. Cejnar, J. Jolie, Phys. Lett. B **420**, 241 (1998); Phys. Rev. E **58**, 387 (1998).
 - [23] J. Jolie, R.F. Casten, P. Cejnar, S. Heinze, E.A. McCutchan, and N.V. Zamfir, Phys. Rev. Lett. **93**, 132501 (2004).
 - [24] M. Macek, J. Dobeš, P. Cejnar (unpublished).
 - [25] <http://www-ucjf.troja.mff.cuni.cz/~geometric/>.

Bibliografie

- [Aba98] G. Abal, A. Romanelli, A. C. Sicardi-Schifino, R. Siri, R. Donangelo
Quantum suppression of chaos in the Fermi accelerator
Physica A **257**, 289 (1998)
- [Arn63a] V. I. Arnol'd
Proof of a Theorem of A. N. Kolmogorov on the Invariance of Quasi-periodic Motions Under Small Perturbations of the Hamiltonian
Russian Mathematical Survey **18**, č. 5, 9 (1963)
- [Arn63b] V. I. Arnol'd
Small Denominators and Problems of Stability of Motion in Classical and Celestial Mechanics
Russian Mathematical Survey **18**, č. 6, 85 (1963)
- [Bae08] S. De Baerdemacker
The geometrical Bohr-Mottelson model: Analytic solutions and an algebraic Cartan-Weyl perspective
Doktorská práce (Universiteit Gent, Belgie, 2008)
- [Bal98] L. E. Ballentine, S. M. McRae
Moment equations for probability distributions in classical and quantum mechanics
Physical Review A **58**, 1799 (1998)
- [Bal02] L. E. Ballentine
Dynamics of quantum-classical differences for chaotic systems
Physical Review A **65**, 062110 (2002)
- [Bar99] C. I. Barbosa, C. L. Lima, M. S. Hussein, M. P. Pato
Deformed Gaussian orthogonal ensemble and the statistical fluctuations in the spectra of the quartic oscillator
Physical Review E **59**, 321 (1999)
- [Ber77] M. V. Berry, M. Tabor
Level clustering in the regular spectrum
Proceedings of the Royal Society A **356**, 375 (1977)
- [Ber84] M. V. Berry, M. Robnik
Semiclassical level spacings when regular and chaotic orbits coexist
Journal of Physics A **17**, 2413 (1984)

- [Ber87] M. Berry
Quantum Chaology
Proceedings of the Royal Society A **413**, 183 (1987)
- [Boh84] O. Bohigas, M. J. Giannoni, C. Schmit
Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws
Physical Review Letters **52**, 1 (1984)
- [Boh98] A. Bohr, B. Mottelson
Nuclear Structure, sv. 2 (World Scientific, Singapore, 1998)
- [Bro73] T. A. Brody
Statistical measure for repulsion of energy-levels
Lettere Nuovo Cimento **7**, 482 (1973)
- [Bro81] T. A. Brody, J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey, S. S. M. Wong
Random-matrix physics: spectrum and strength fluctuations
Reviews of Modern Physics **53**, 385 (1981)
- [Cai97] L. Caiani, L. Casetti, C. Clementi, M. Pettini
Geometry of dynamics, Lyapunov exponents, and phase transitions
Physical Review Letters **79**, 4361 (1997)
- [Cap03] M. A. Caprio
Simplified approach to the application of the geometric collective model
Physical Review C **68**, 054303 (2003)
- [Cas93] L. Casetti, M. Pettini
Analytic computation of the strong stochasticity threshold in Hamiltonian dynamics using Riemannian geometry
Physical Review E **48**, 4320 (1993)
- [Cas96] L. Casetti, C. Clementi, M. Pettini
Riemannian theory of Hamiltonian chaos and Lyapunov exponents
Physical Review E **54**, 5969 (1996)
- [Cau90] E. Caurier, B. Grammaticos, A. Ramani
Level repulsion near integrability: a random matrix analogy
Journal of Physics A **23**, 4903 (1990)
- [Cej03] P. Cejnar, S. Heinze, and J. Jolie
Ground-state shape phase transitions in nuclei: Thermodynamic analogy and finite- N effects
Physical Review C **68**, 034326 (2003)
- [Cer96] M. Cerruti-Sola, M. Pettini
Geometric description of chaos in two-degrees-of-freedom Hamiltonian systems
Physical Review E **53**, 179 (1996)

- [Che90] T. Cheon
Eigenvalue Statistics of Distorted Random Matrices
Physical Review Letters **65**, 529 (1990)
- [Cso94] A. Csordás, R. Graham, P. Szépfalussy, G. Vattay
Transition from Poissonian to Gaussian-orthogonal-ensemble level statistics in a modified Artin's billiard
Physical Review E **49**, 325 (1994)
- [Cvi08] P. Cvitanović, R. Artuso, R. Mainieri, G. Tanner and G. Vattay
Chaos: Classical and Quantum (Niels Bohr Institute, Copenhagen, 2008)
<http://www.ChaosBook.org>
- [Dre91] K. Dreyer, F. R. Hickey
The route to chaos in a dripping water faucet
American Journal of Physics **59**, 619 (1991)
- [Eis70] J. M. Eisenberg, W. Greiner
Nuclear theory, sv. 1, Nuclear Models (North-Holland, Amsterdam, 1970)
- [Eis94] E. Eisenberg, N. Shnerb
Suppression of chaos, quantum resonance, and statistics of a nonintegrable system
Physical Review E **49**, R941 (1994)
- [Fal04] E. Faleiro, J. M. G. Gómez, R. A. Molina, L. Muñoz, A. Relaño, J. Retamosa
Theoretical Derivation of $1/f$ Noise in Quantum Chaos
Physical Review Letters **93**, 244101 (2004)
- [Fei89] M. Feingold, D. M. Leitner, O. Piro
Semiclassical structure of Hamiltonians
Physical Review A **39**, 6507 (1989)
- [Fin96] G. A. Finney, J. Gea-Banacloche
Quantum suppression of chaos in the spin-boson model
Physical Review E **54**, 1449 (1996)
- [Fro97] C. Froeschlé, E. Lega, R. Gonczi
Fast Lyapunov indicators. Application to asteroidal motion
Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy **67**, 41 (1997)
- [For05] L. Fortunato
Solutions of the Bohr Hamiltonian, a compendium
European Physical Journal A **26**, 1 (2005)
- [Gre96] W. Greiner, J. A. Maruhn
Nuclear Models (Springer, Berlin, Heidelberg, 1996)
- [Gne69] G. Gneuss, U. Mosel, W. Greiner
New Treatment of the Collective Nuclear Hamiltonian
Physics Letters **30B**, 161 (1969)

- [Gne70a] G. Gneuss, U. Mosel, W. Greiner
On The Relationship Between the Level-Structures in Spherical and Deformed Nuclei
Physics Letters **31B**, 269 (1970)
- [Gne70b] G. Gneuss, W. Greiner, U. Mosel
Even-Odd-Staggering in γ -Bands
Physics Letters **32B**, 161 (1970)
- [Gom05] J. M. G. Gómez, A. Relaño, J. Retamosa, E. Faleiro, L. Salasnich, M. Vraničar, M. Robnik
 $1/f^\alpha$ Noise in Spectral Fluctuations of Quantum Systems
Physical Review Letters **94**, 084101 (2005)
- [Gut70] M. C. Gutzwiller
Energy Spectrum According to Classical Mechanics
Journal of Mathematical Physics **11**, 1791 (1970)
- [Gut90] M. C. Gutzwiller
Chaos in Classical and Quantum Mechanics (Springer-Verlag, New York, 1990)
- [Haa92] F. Haake
Quantum Signatures of Chaos (Springer, Berlin, 1992)
- [Hal84] E. Haller, H. Köppel, L. S. Cederbaum
Uncovering the Transition from Regularity to Irregularity in a Quantum System
Physical Review Letters **52**, 1665 (1984)
- [Hen64] M. Hénon, C. Heiles
The Applicability of the Third Integral of Motion: Some Numerical Experiments
Astronomical Journal **69**, 73 (1964)
- [Hor07] L. Horwitz, Y. B. Zion, M. Lewkowicz, M. Schiffer, J. Levitan
Geometry of Hamiltonian chaos
Physical Review Letters **98**, 234301 (2007)
- [Iac87] F. Iachello, A. Arima
The Interacting Boson Model (Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 1987)
- [Iac00] F. Iachello
Dynamic Symmetries at the Critical Point
Physical Review Letters **85**, 3580 (2000)
- [Iac01] Analytic Description of Critical Point Nuclei in a Spherical-Axially Deformed Shape Phase Transition
Physical Review Letters **87**, 052502 (2001)
- [Hru08] P. Hruška
Regulární a chaotické pohyby atomových jader
Diplomová práce (Karlova univerzita, Praha, 2008)

- [Kol54] A. N. Kolmogorov
Doklady Akademii Nauk SSSR **98**, 527 (1954)
- [Las92] J. Laskar, C. Froeschlé, A. Celletti
The measure of chaos by the numerical analysis of the fundamental frequencies.
Application to the standard mapping
Physica D **56**, 253 (1992)
- [Len91] G. Lenz, F. Haake
Reliability of small matrices for large spectra with nonuniversal fluctuations
Physical Review Letters **67**, 1 (1991)
- [Lev26] T. Levi-Civita
Sur l'écart géodésique
Mathematische Annalen **97**, 291 (1926)
- [Li02] W. Li, L. E. Reichl, B. Wu
Quantum chaos in a ripple billiard
Physical Review E **65**, 056220 (2002)
- [Lor63] E. N. Lorenz
Deterministic Nonperiodic Flow
Journal of the Atmospheric Sciences **20**, 130 (1963)
- [Lor69] E. N. Lorenz
Atmospheric Predictability as Revealed by Naturally Occurring Analogues
Journal of the Atmospheric Sciences **26**, 636 (1969)
- [Man99] B. B. Mandelbrot
Multifractals and 1/f Noise (Stringer, New York, 1999)
- [Meh04] M. L. Mehta
Random Matrices, 3. vydání (Elsevier, 2004)
- [Mos62] J. Moser
Nachrichten der Akademie der Wissenschaften in Göttingen: II. Mathematisch-Physikalische Klasse **1**, 1 (1962)
- [Noa68] C. C. Noack
On irreducible tensors of O_5^+
Nuclear Physics A **108**, 493 (1968)
- [Nik09] T. Nikšić, Z. P. Li, D. Vretenar, L. Próchniak, J. Meng, P. Ring
Beyond the relativistic mean-field approximation. III. Collective Hamiltonian in five dimensions
Physical Review C **79**, 034303 (2009)
- [Per73] I. C. Percival
Regular and irregular spectra
Journal of Physics B **6**, L229 (1973)

- [Per84a] A. Peres
New Conserved Quantities and Test for Regular Spectra
Physical Review Letters **53**, 1711 (1984)
- [Per84b] A. Peres
Stability of quantum motion in chaotic and regular systems
Physical Review A **30**, 1610 (1984)
- [Pet93] M. Pettini
Geometrical hints for a nonperturbative approach to Hamiltonian dynamics
Physical Review E **47**, 828 (1993)
- [Ple02] V. Plerou, P. Gopikrishnan, B. Rosenow, L. A. N. Amaral, T. Guhr, H. E. Stanley
Random matrix approach to cross correlations in financial data
Physical Review E **65**, 066126 (2002)
- [Poi90] J. H. Poincaré
Sur le problème des trois corps et les équations de la dynamique. Divergence des séries de M. Lindstedt
Acta Mathematica **13**, 1 (1890)
- [Pos83] M. Postnikov
The Variational Theory of Geodesics (Dover, New York, 1983)
- [Pro94] T. Prosen, M. Robnik
Semiclassical energy level statistics in the transition region between integrability and chaos: transition from Brody-like to Berry-Robnik behaviour
Journal of Physics A **27**, 8059 (1994)
- [Pro98] T. Prosen
Berry-Robnik level statistics in a smooth billiard system
Journal of Physics A **31**, 7023 (1998)
- [Pro99] T. Prosen, M. Robnik
Intermediate $E(k, L)$ statistics in the regime of mixed classical dynamics
Journal of Physics A **32**, 1963 (1999)
- [Ram01] K. Ramasubramanian, M. S. Sriram
Global geometric indicator of chaos and Lyapunov exponents in Hamiltonian systems
Physical Review E **64**, 046207 (2001)
- [Ree99] S. Ree, J. E. Reichl
Classical and quantum chaos in a circular billiard with a straight cut
Physical Review E **60**, 1615 (1999)
- [Rei92] L. E. Reichl
The Transition to Chaos (Springer, New York, 1992)

- [Rel02] A. Relaño, J. M. G. Gómez, R. A. Molina, J. Retamosa
Quantum Chaos and $1/f$ Noise
Physical Review Letters **89**, 244102 (2002)
- [Rel06] A. Relaño, J. Retamosa, E. Faleiro, R. A. Molina, A. P. Zuker
 $1/f$ noise and very high spectral rigidity
Physical Review E **73**, 026204 (2006)
- [Rob84] M. Robnik
Quantising a generic family of billiards with analytic boundaries
Journal of Physics A **17**, 1049 (1984)
- [Rob98] D. T. Robb, L. E. Reichl
Chaos in a two-spin system with applied magnetic field
Physical Review E **57**, 2458 (1998)
- [San05] M. S. Santhanam, J. N. Bandyopadhyay
Spectral Fluctuations and $1/f$ Noise in the Order-Chaos Transition Regime
Physical Review Letters **95**, 114101 (2005)
- [Sar94] J. C. Sartorelli, W. M. Goncalves, R. D. Pinto
Crisis and intermittence in a leaky-faucet experiment
Physical Review E **49**, 3963 (1994)
- [Sko01] Ch. Skokos
Alignment indices: a new, simple method for determining the ordered or chaotic nature of orbits
Journal of Physics A **34**, 10029 (2001)
- [Sko04] Ch Skokos, Ch. Antonopoulos, T. C. Bountis, M. N. Vrahatis
Detecting order and chaos in Hamiltonian systems by the SALI method
Journal of Physics A **37**, 6269 (2004)
- [Sto99] H. J. Stöckmann
Quantum Chaos. An Introduction (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1999)
- [Vog94] N. Voglis, G. Contopoulos
Invariant spectra of orbits in dynamical systems
Journal of Physics A **27**, 4899 (1994)
- [Zim86] T. Zimmermann, H.-D. Meyer, H. Köppel, L. S. Cederbaum
Manifestation of classical chaos in the statistics of quantum energy levels
Physical Review A **33**, 4334 (1986)
- [Zio07] Y. B. Zion, L. Horowitz
Detecting order and chaos in three-dimensional Hamiltonian systems by geometrical methods
Physical Review E **76**, 046220 (2007)

- [Zio08] Y. B. Zion, L. Horowitz
Applications of geometrical criteria for transition to Hamiltonian chaos
Physical Review E **78**, 036209 (2008)

Poznámka:

Bibliografie je řazena abecedně podle příjmení prvního autora.

Seznam vlastních prací

- [**Cej04**] P. Cejnar, P. Stránský
Regular and chaotic vibrations of deformed nuclei with increasing γ -rigidity
Physical Review Letters **93**, 102502 (2004)
(přetištěn v dodatku I)
- [**Str06**] P. Stránský, M. Kurian, P. Cejnar
Classical chaos in the geometric collective model
Physical Review C **74**, 014306 (2006)
(přetištěn v dodatku II)
- [**Mac07a**] M. Macek, P. Stránský, P. Cejnar, S. Heinze, J. Jolie, J. Dobeš
Classical and quantum properties of the semiregular arc inside the Casten triangle
Physical Review C **75**, 064318 (2007)
- [**Mac07b**] M. Macek, P. Stránský, P. Cejnar
Order and chaos in the interacting boson model
Physics of Atomic Nuclei **70**, sv. 9, 1592 (2007)
- [**Str07**] P. Stránský, P. Cejnar, M. Macek
Order and chaos in the geometric collective model
Physics of Atomic Nuclei **70**, sv. 9, 1572 (2007)
(přetištěn v dodatku III)
- [**Cej08**] P. Cejnar, P. Stránský
Impact of quantum phase transitions on excited level dynamics
Physical Review E **78**, 031130 (2008)
arXiv:0807.3649 [quant-ph]
- [**Cej09a**] P. Cejnar, P. Stránský, M. Macek
Quantum phase transitions and nuclear structure
International Journal of Modern Physics E **18**, 965 (2009)
- [**Mac09**] M. Macek, P. Stránský, P. Cejnar
Peres lattices in nuclear structure
International Journal of Modern Physics E **18**, 1058 (2009)
arXiv:0810.2949 [nucl-th]
- [**Str09a**] P. Stránský, P. Hruška, P. Cejnar
Quantum chaos in the nuclear collective model: Classical-quantum correspondence
Physical Review E **79**, 046202 (2009)

(přetištěn v dodatku IV)
arXiv:0902.3983 [quant-ph]

- [**Str09b**] P. Stránský, P. Hruška, P. Cejnar
Quantum chaos in the nuclear collective model: Peres Lattices
Physical Review E **79**, 066201 (2009)
(přetištěn v dodatku V)
arXiv:0902.4155v1 [quant-ph]
- [**Str04**] P. Stránský
Fázové přechody v geometrických a bosonových jaderných modelech
Diplomová práce (Karlova univerzita, Praha, 2004)
- [**Cej06**] P. Cejnar, M. Macek, P. Stránský, M. Kurian
Regular and chaotic nuclear vibrations
in: Capture Gamma-Ray Spectroscopy and Related Topics, ed. A. Woehr, A. Aprahamian (AIP Conference Proceedings 819, 2006), str. 487
- [**Cej09b**] P. Cejnar, P. Stránský
Quantum phase transitions for excited states
in: Capture Gamma-Ray Spectroscopy and Related Topics, ed. A. Blazhev, J. Jolie, N. Warr, A. Zilges (AIP Conference Proceedings 1090, 2009), str. 169
- [**Str09c**] P. Stránský, M. Macek, P. Cejnar, J. Dobeš
Peres lattices in nuclear structure and beyond
in: Capture Gamma-Ray Spectroscopy and Related Topics, ed. A. Blazhev, J. Jolie, N. Warr, A. Zilges (AIP Conference Proceedings 1090, 2009), str. 174
- [**www**] <http://www-ucjf.troja.mff.cuni.cz/~stransky/results>

Poznámka:

Seznam vlastních prací je řazen chronologicky podle data publikace, přičemž nejprve jsou uvedeny publikace v recenzovaných časopisech (černým písmem), následně ostatní práce (šedivým písmem).

Errata

Toto je dotisk originální doktorské práce. V textu byly opraveny drobné překlepy, typografické a stylistické chyby. Věcný obsah zůstal nezměněn.

Zde je uveden úplný seznam změn:

- *Lyapunovovův* změněno na *Lyapunovův* v celém textu.
- Strana 3, popis obrázku 1.1:
Hamiltonián změněno na *Hamiltonova funkce*¹.
- Strana 6, 2. odstavec části 1.2.2:
Hamiltoniánem změněno na *Hamiltonovou funkci*.
- Strana 7, 3. odstavec:
Hamiltonián změněno na *Hamiltonova funkce*.
- Strana 7, poslední odstavec sekce 1.2.2:
Věta *Trajektorie tohoto systému jsou vždy stabilní, dochází nejvýše k jejich lineárnímu vzdalování.* nahrazena textem *Trajektorie tohoto systému jsou vždy stabilní, jejich vzdalování je pomalejší než exponenciální.*
- Strana 12, vzorec (1.12):
Doplň zlomek $\frac{1}{t}$.
- Strana 12, předposlední odstavec:
Odstavec s textem *Uveďme zde poznámku k definici Lyapunovova exponentu (1.12).* odstraněn.
- Strana 14, první položka seznamu •:
Označení matice *J* nahrazeno *J*.
- Strana 15, poznámka 13:
Vloženo slovo *anglický*.
- Strana 17, konec prvního odstavce:
Sousloví *přesto však* nahrazeno slovem *avšak*.

¹Termín *Hamiltonova funkce* je v práci vyhrazen pro označení příslušné funkce v klasické fyzice — narozdíl od obecnějšího označení *Hamiltonián*, který zastupuje i operátor v kvantovém případě

- Strana 21, text za rovnicí (1.33):
Hamiltoniánem změněno na *Hamiltonovou funkci*.
- Strana 24, konec 1. odstavce:
označíme za změněno na *nazveme*.
- Strana 35, poslední odstavec sekce 1.3.6:
pojdnává změněno na *pojdnávají*.
- Strana 36, vzorec (1.66):
Doplňn zlomek $\frac{1}{T}$.
- Strana 52, poslední věta před začátkem sekce 2.2.4:
Věta *Ilustrace je uvedena v bezprostředně následující části*. změněna na *Ilustrace je uvedena v následující části*.
- Strana 55, poslední věta:
První z nich, zobrazený... změněno na *První, zobrazený...*
- Strana 70, začátek 2. odstavce:
alpha - 1 opraveno na $\alpha - 1$.
- Strana 91, 3. odstavec:
Věta *Mějme uživatelskou funkci, uloženou v souboru algebra.txt, s takovýmto jednoduchým obsahem: nahrazena textem Mějme uživatelskou funkci, která je uložena v souboru algebra.txt a obsahuje tyto jednoduché příkazy:*
- Strana 161-162:
Aktualizovány reference [Str09b], [Cej09a], [Mac09].