

Řád a chaos v jednoduchém modelu molekulárních vibrací

Jakub Novotný

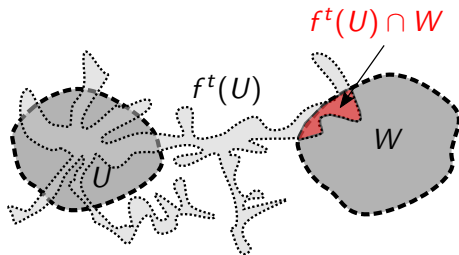
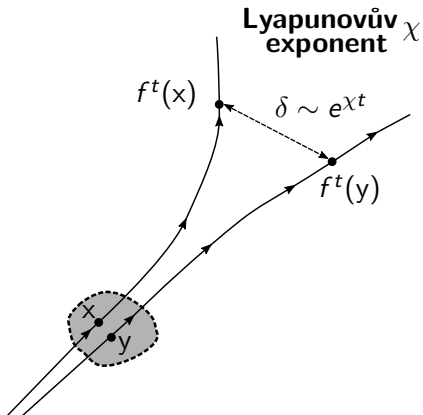
Ústav částicové a jaderné fyziky
MFF UK

18. září 2020

Obsah

- Chaos
- Model vibrací
- Cíle
- Výsledky

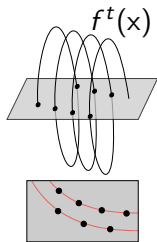
Chaos



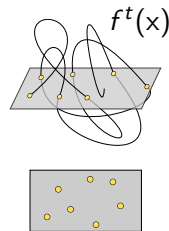
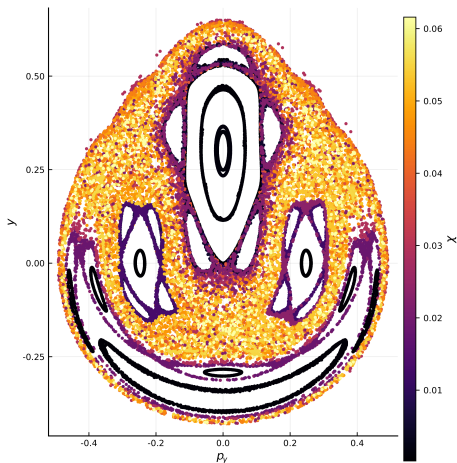
- Citlivost na změnu počátečních podmínek

- Mísení fázového prostoru

Poincarého řez



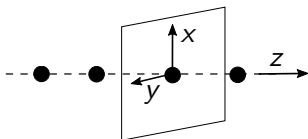
Regulární
trajektorie



Chaotická
trajektorie

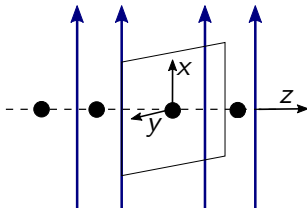
Model vibrací

$$\hat{H}(A, B, C) = E, \quad E - \text{energie}$$



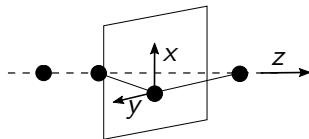
parametr

A



intenzita vnějšího pole

C

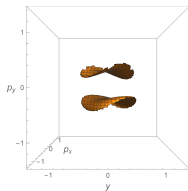


parametr

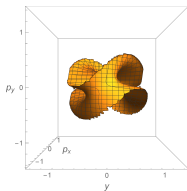
B

Cíle

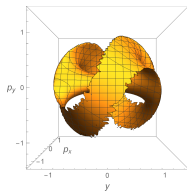
- Klasická limita kvantového modelu
- Výpočet Lyapunovových exponentů
- Výpočet Poincarého řezů
- Metoda na určení podílu chaotických oblastí
- Určení závislosti Lyapunovova exponentu a podílu chaotických oblastí na energii a síle poruchy



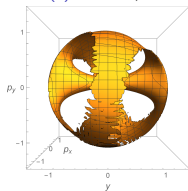
(a) $x = -1,2$



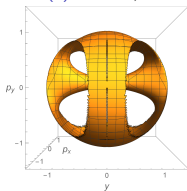
(b) $x = -1,0$



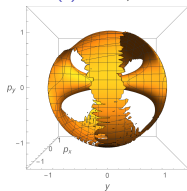
(c) $x = 0,6$



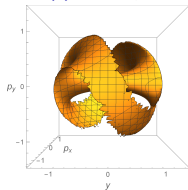
(d) $x = -0,2$



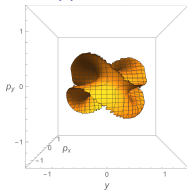
(e) $x = 0,0$



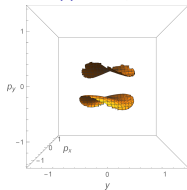
(f) $x = 0,6$



(g) $x = 0,6$



(h) $x = 1,0$



(i) $x = 1,2$

Fázový prostor

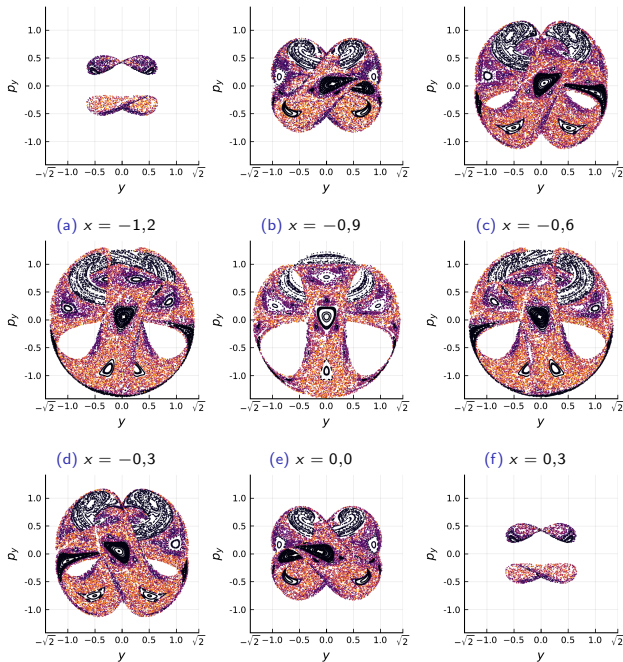
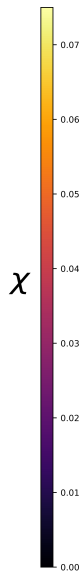
Řezy
energetickou
nadplochou

$$E = 0$$

$$A = 0,1$$

$$B = -0,8$$

$$C = 0,25$$



Fázový prostor

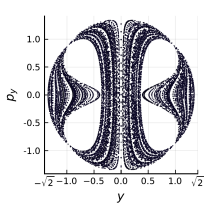
Poincarého
řezy
energetickou
nadplochou

$$E = 0$$

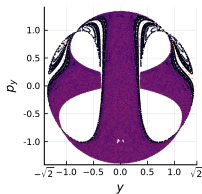
$$A = 0,1$$

$$B = -0,8$$

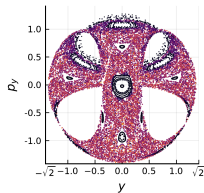
$$C = 0,25$$



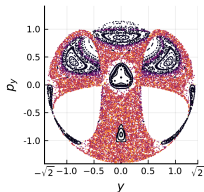
(a) $C = 0,0$



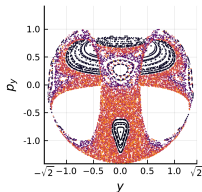
(b) $C = 0,2$



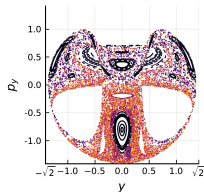
(c) $C = 0,4$



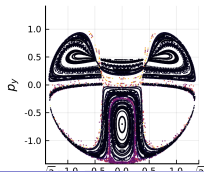
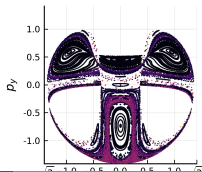
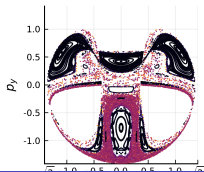
(d) $C = 0,6$



(e) $C = 0,8$



(f) $C = 1,0$



Fázový prostor

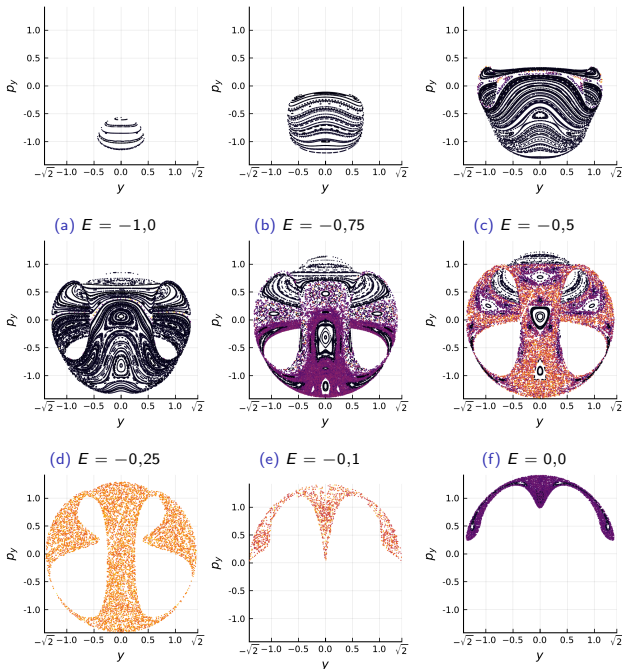
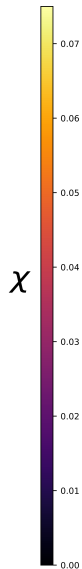
Poincarého
řezy
energetickou
nadplochou

$$E = 0$$

$$A = 0,1$$

$$B = -0,8$$

$$x = 0,0$$



Fázový prostor

Poincarého
řezy
energetickými
nadvlohami

$C = 0,5$

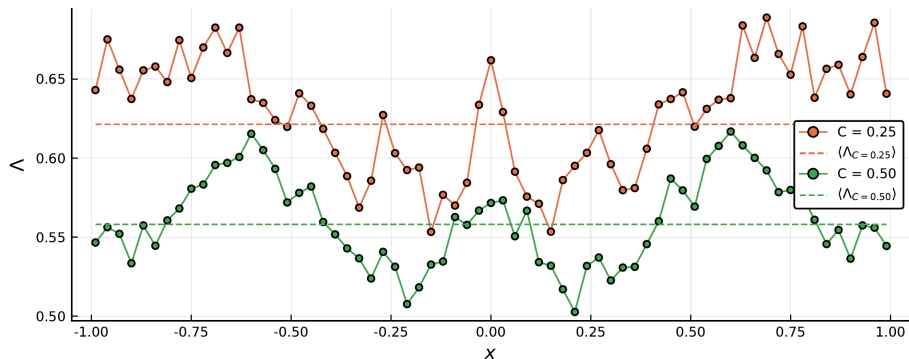
$A = 0,1$

$B = -0,8$

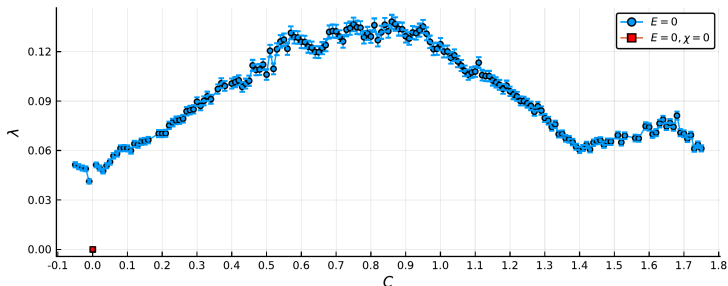
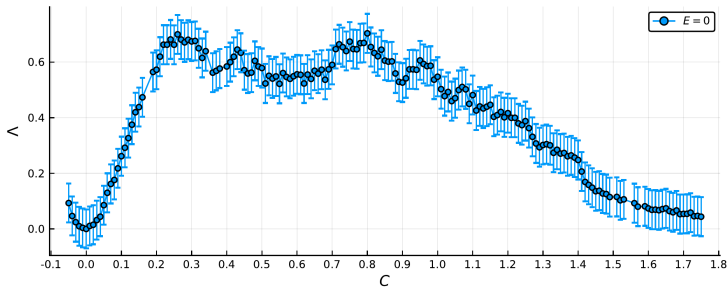
$x = 0,0$

Metoda na určení podílu chaotického objemu

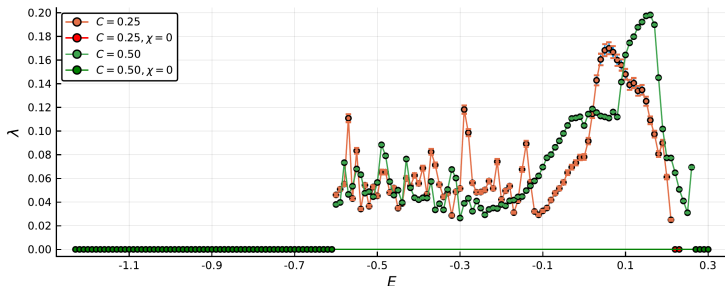
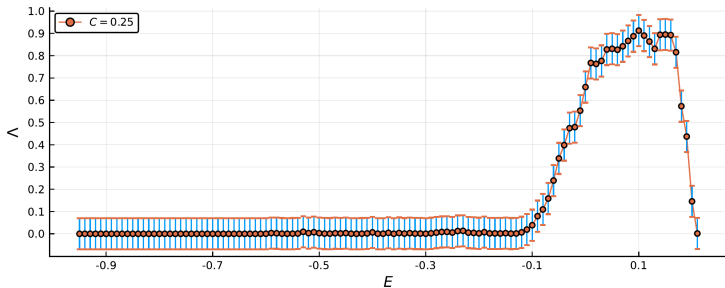
$$\Lambda = \frac{\text{chaotický objem energetické nadplochy}}{\text{celkový objem energetické nadplochy}}$$



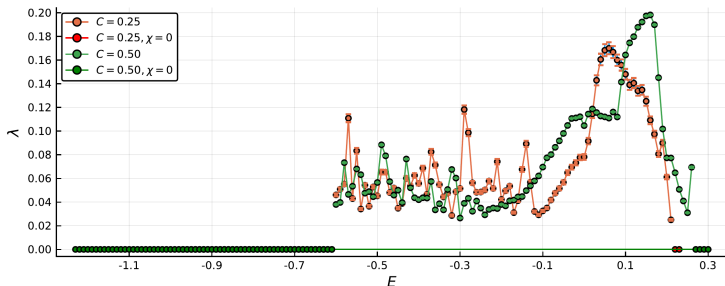
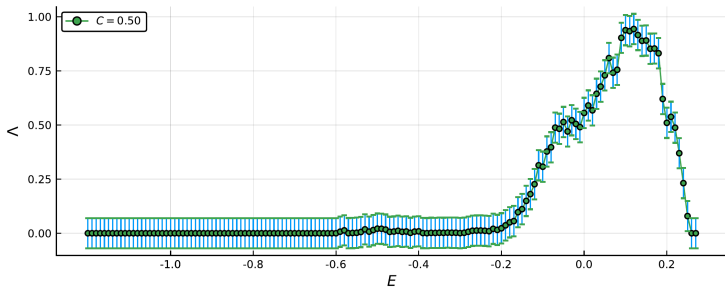
Závislost chaotičnosti na síle poruchy



Závislost chaotičnosti na energii



Závislost chaotičnosti na energii



Závěr

- Schopnost určit (relativně rychle a s požadovanou přesností) chování identifikátorů klasického chaosu (Lyapunovův exponent, podíl chaotického objemu, Poincarého řezu) v závislosti na parametrech modelu molekulárních vibrací

Děkuji za pozornost.

Symetrie

$$\hat{H}|\psi\rangle = \hat{H}\hat{R}|\psi\rangle = E \quad - \text{symetrie hamiltoniánu}$$

$$\hat{R} \rightarrow \hat{R}_{n\phi} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\phi} \quad - \text{např. operátor rotace kolem osy } z$$

$\hat{R}_{n\phi}$ - prvek grupy $O(2)$ symetrie hamiltoniánu

$\hat{J}_z$ - generátor symetrie hamiltoniánu; prvek algebry $\mathfrak{o}(2)$

$\mathfrak{g}$ - *algebra dynamických symetrií (spektrum generující algebra)*

$\mathfrak{g}''$ - *algebra symetrie*

$$\mathfrak{g} \supset \mathfrak{g}' \supset \mathfrak{g}'' \dots$$

Klasický hamiltonián

$$\begin{aligned} \frac{H}{N} = H_{\text{cl}} = & A \left[\sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2) \right] + B \left[(p_x^2 + p_y^2) \left(2 - \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2) \right) \right. \\ & \left. + (p_y q_x - q_y p_x)^2 \right] + C \left[p_y \sqrt{2 - \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2)} \right]. \end{aligned}$$