

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

DISERTAČNÍ PRÁCE

Vlastnosti rydbergovské hmoty

Praha 2019

Michal Špaček

Bibliografický záznam:

Autor:	Ing. Michal Špaček České vysoké učení technické v Praze Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská Katedra fyziky
Název práce:	Vlastnosti rydbergovské hmoty
Studijní program:	Aplikace přírodních věd
Studijní obor:	Jaderné inženýrství
Školitel	doc. RNDr. Vojtěch Petráček, CSc. České vysoké učení technické v Praze Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská Katedra fyziky
Akademický rok:	2019/2020
Počet stran:	196
Klíčová slova:	rydbergovská hmota, clustery, šesterečná symetrie, permanentní elektrický dipól, Starkovo štěpení, Poissonova rovnice ve válcových souřadnicích, keplerovský pohyb, elektrostatická past, akceptance pasti, polní mapa, lokální interpolace polní mapy, reciproká mříž, Fourierův rozklad funkcí více proměnných, multiplicita, difrakce, částice v jámě konečné hloubky, atom vodíku, rydbergovské stavy, kruhové stavy, lineární kombinace atomových orbitalů (LCAO), překryvový a coulombický integrál, antivodík, experiment AEGIS, rydbergovský atom vodíku, atom vodíku v křížných polích, stará kvantová teorie

Bibliographic Entry:

Author: Ing. Michal Špaček
Czech Technical University in Prague
Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Department of Physics

Title of Dissertation: Properties of Rydberg Matter
Degree Programme: Applications of Natural Sciences
Field of Study: Nuclear Engineering
Supervisor: doc. RNDr. Vojtěch Petráček, CSc.
Czech Technical University in Prague
Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Department of Physics

Academic Year: 2019/2020
Number of Pages: 196
Keywords: Rydberg matter, clusters, hexagonal symmetry, permanent electric dipole, Stark splitting, Poisson equation in cylindrical coordinates, Keplerian motion, electrostatic trap, trap acceptance, field map, local interpolation of a field map, reciprocal lattice, Fourier series of multivariable functions, multiplicity, diffraction, particle in a finite well, hydrogen atom, Rydberg states, circular states, Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO), overlap and Coulombic integral, antihydrogen, AEGIS experiment, hydrogen atom in Rydberg states, hydrogen atom in crossed fields, Old Quantum Theory

Poděkování

Chtěl bych poděkovat svému školiteli doc. RNDr. Vojtěchu Petráčkovi, CSc. za seznámení s tématem rydbergovské hmoty a za všechnu jeho trpělivou pomoc, profesní i osobní, kterou mi během celého studia věnoval.

Studentu Bc. Rastislavu Čermákovi děkuji za pomoc při převodu zdrojového kódu simulačního programu pohybů dipólových částic ve vnějších polích z jazyka Pascal do jazyka C++ ve formě, která byla předána k užívání dalším studentům.

Konečně děkuji svým rodičům a vůbec celé rodině a přátelům za projevovanou podporu a zájem během doby, kdy práce vznikala. Obzvláštní dík patří Hance, kterou jsem během doktorátu poznal a během kterého se stala i mou ženou.

Abstrakt:

Předkládaná práce se zabývá z větší části rydbergovskou hmotou, především tou její formou, která se vyskytuje ve formě rovinných clusterů. Tématu je věnována rozsáhlá rešerše z dostupných zdrojů.

Je studován pohyb částic s permanentním elektrickým dipólem v elektrostatických polích v rámci modelu zkonstruovaného autorem v jeho dřívějších pracích. Pro zvolenou konfiguraci elektrod s přesným řešením Poissonovy rovnice je doloženo, že ve vhodně zvolené soustavě souřadnic může částice vykonávat keplerovský pohyb po uzavřené křivce. Kritéria, aby se tento pohyb celý vešel do oblasti volného prostoru mezi elektrodami – tedy akceptance pasti –, jsou přesně odvozena v řeči bezrozměrných parametrů a jsou diskutovány případy, kdy by permanentní elektrický dipól mohla mít i rydbergovská hmota. Dále je zkonstruována metoda lokální interpolace polní mapy, která navazuje spojitě i první derivace a která tvoří jádro simulačního programu vyvinutého pro studium pohybu dipólové částice v zadaných vnějších polích.

Je navržen způsob vyjádření funkcí dvou proměnných s šestičetnou (hexagonální) symetrií, které by měly popisovat rozložení elektronů v clusteru rydbergovské hmoty, a tato forma je prokázána pro dvě vybrané funkce. Je nalezena reciproká mříž dvourozměrně uspořádaného krystalu s hexagonální symetrií v třírozměrném prostoru a analyzována multiplicita jeho nadrovin vzhledem k difrakci. Je navržen způsob, jak difrakční spektrum clusteru laboratorně změřit, a to se zářením méně energetickým než rentgenovým.

Je zkonstruován model částice v potenciálové jámě, jejíž šířka se mění s kvantovým stavem částice. Je nalezena třída funkcí vhodně aproximujících přesné vodíkové vlnové funkce s nejvyšším možným momentem hybnosti. Pro nejmenší cluster rydbergovské hmoty je formulována LCAO úloha (Roothaanova rovnice) a ta je přesně vyřešena. Pomocí aproximačních funkcí jsou odhadnuty překryvové a coulombické integrály a odhadnuto energetické spektrum clusteru.

V závěru práce je představena pohybová rovnice pro atom vodíku (resp. antivodíku) v křížných polích z autorových dřívějších prací a popsán simulační program, který ji řeší v reáliích experimentu AEGIS v CERNu. Je nalezeno přesné partikulární řešení Poissonovy rovnice ve válcových souřadnicích s podélnými prostorovými gradienty a toto pole použito jako modelové pro studium komplexního pohybu antivodíku v křížných polích. Na základě simulací jsou vyslovena tvrzení o obecných zákonitostech pohybu antivodíku v křížných polích válcové symetrie a jejich důsledky pro experiment AEGIS.

Abstract:

The thesis deals primarily with the Rydberg matter, particularly when condensed into planar clusters. The current knowledge on the subject from available sources is presented.

The motion of particles with permanent electric dipole in electrostatic fields is explored in the frame of a model designed in the author's earlier works. In a selected configuration of electrodes with an exact solution to the Poisson equation, it is demonstrated that a particle can perform a Keplerian motion on a closed orbit. The criterion to fit the orbit into a free space between the electrodes – the acceptance of the trap – is expressed in dimensionless parameters and examples of Rydberg matter with permanent electric dipole are suggested. A local interpolation of a field map, which is continuous in the first derivative of the field and which is the heart of the simulation code, is constructed.

A form of the two-variable functions with hexagonal symmetry linked to the electron density of Rydberg matter clusters is suggested and proved for two particular functions. The reciprocal lattice of a two-dimensional crystal in three-dimensional space is found and the multiplicity of its hyperplanes regarding the diffraction is analyzed. A method of measuring the diffraction spectrum of a cluster in a laboratory, which could work with less energetic radiation than X-rays, is proposed.

A model of a finite well potential with the width dependent on the quantum state is explored. The exact wavefunctions of a hydrogen-like atom with the highest possible angular momentum are approximated. For the smallest cluster of the Rydberg matter, LCAO problem is formulated (Roothaan equation) and solved exactly. Overlap and Coulombic integrals and the spectrum of the cluster are roughly estimated on the basis of the approximated wavefunctions.

At the end of the thesis, the equation of motion of a hydrogen (or antihydrogen) atom in crossed fields is introduced, stemming from the author's previous work, and a simulation program is described which the author co-developed and which solves the equation for the AEGIS experiment in CERN. An exact particular solution to the Poisson equation in cylindrical coordinates is found which evinces longitudinal spatial gradients and which is used as a model field to study the complex motion of antihydrogen in crossed fields. Based on the simulations, claims are made about general tendencies for the antihydrogen motion in crossed fields and their consequences for the AEGIS experiment.

Obsah

1 Rydbergovská hmota	24
1.1 Přechod vzbuzeného plynu do kovového stavu; cluster	24
1.2 Rydbergovská hmota jako zvláštní fáze látky	26
1.3 Energetická struktura rydbergovské hmoty	27
1.4 Vznik a detekce rydbergovské hmoty; spektrální vlastnosti	30
1.5 Rydbergovská hmota ve vesmíru	31
1.6 Uspořádávání clusterů do vláken; magnetické vlastnosti clusterů a jejich srážky	32
1.7 Modelové přístupy k rydbergovské hmotě	32
1.8 Rydbergovská hmota v zemské atmosféře a v jiných oblastech nebo jevech	33
1.9 Rydbergovská hmota a lasery	34
1.10 Výběr poznatků významných pro tuto práci	34
2 Keplerovský pohyb elektrického dipólu; interpolace polní mapy spojitá v první derivaci	36
2.1 Dynamika permanentního elektrického dipólu v adiabatické aproximaci	37
2.2 Řešení Poissonovy rovnice pro vakuovou oblast mezi cylindrickými elek- trodami	40
2.3 Keplerovský pohyb částice s elektrickým dipólem mezi cylindrickými elek- trodami	43
2.4 Parametrizace keplerovského pohybu a kritéria zachycení částice s elek- trickým dipólem	47
2.5 Rozbor keplerovské pasti	53
2.6 Selhání lineární i kubické lokální interpolace polní mapy pro částici s elektrickým dipólem	55

2.7	Konstrukce lokální interpolace polní mapy spojitě do první derivace včetně	58
2.8	Rozbor interpolačního schématu	61
3	Difrakce záření na rovinných clusterech rydbergovské hmoty	65
3.1	Sudé funkce jedné proměnné; jejich Fourierovy rozvoje a Fourierovy obrazy	65
3.2	a -periodické funkce dvou proměnných se čtvercovou symetrií	74
3.3	Modelová a -periodická funkce dvou proměnných se čtvercovou symetrií	79
3.4	Reciproká mříž pro a -periodické funkce s hexagonální symetrií – krysta- lografická definice	83
3.5	Reciproká mříž pro a -periodické funkce s hexagonální symetrií – kon- strukce z požadavků symetrie	85
3.6	Modelová funkce pro a -periodické funkce hexagonální symetrie	88
3.7	Fourierův rozklad modelové funkce	91
3.8	Velikost clusteru a počet uzlů v něm	96
3.9	Indexování (nad)rovin	98
3.10	Omezení na vlnové délky	101
3.11	Multiplicita	102
3.12	Fourierův obraz konečného Diracova hřebenu s šesti-četnou symetrií . . .	105
3.13	Netriviální difrakční obrazec	108
4	LCAO metoda pro nejmenší cluster rydbergovské hmoty	112
4.1	Model jámy s konečnou hloubkou a šířkou proměnnou podle kvantového stavu částice	113
4.2	Metoda LCAO; variační princip	119
4.3	Vodíkové vlnové funkce $\psi_{n,n-1,\pm(n-1)}$	120
4.4	Aproximace vodíkových funkcí $\psi_{n,n-1,\pm(n-1)}$ funkcí $\tilde{\psi}_n$	122
4.5	Normalizace funkcí $\tilde{\psi}_n$ a test aproximace	127
4.6	LCAO pro cluster se sedmi atomy vodíku; Roothaanova rovnice	130
4.7	Geometrický odhad překryvových a coulombických integrálů pomocí $\tilde{\psi}_n$.	140
4.8	Spektrum energií clusteru	147
5	Antivodík v experimentu AEGIS; trajektorie pohybu antivodíku v křížných polích	149
5.1	Experiment AEGIS a gravitační měření	149
5.2	Elektrická a magnetická pole v experimentu AEGIS	151
5.3	Spektrum vodíku ve vnějších polích	154

5.4	Pohybová rovnice atomu vodíku v křížných polích	158
5.5	Rozměrový rámec experimentu	160
5.6	Autorův přínos k experimentu v době doktorátu	161
5.7	Simulační program a výsledky vybraných simulací	162
5.8	Elektrické pole s gradienty podél válcové symetrie	163
5.9	Výsledky simulací	166
6	Závěr	176
	Literatura	190
A	Kód pro výpočet multiplicity v počítači	194

Úvod

Předkládaná dizertační práce se zabývá z větší části rydbergovskou hmotou. Původní autorovo snažení v první polovině doktorátu navazovalo na jeho práci v oblasti fyziky vodíku a antivodíku z magisterského studia a dizertace z ní vychází.

Rydbergovská hmota je považována za zvláštní fázi hmoty. Mikroskopicky je typicky tvořena rovinnými hexagonálními clustery, rozměrnými co do absolutní velikosti, ale malými co do počtu atomů, makroskopicky pak velkým souborem (oblakem) těchto clusterů. Teoreticky byla předpovězena kolem roku 1980 a v devadesátých letech dvacátého století i experimentálně prokázána v laboratořích; doklady jejího přirozeného výskytu například ve vesmíru se hledají. Komunita, která se studiem rydbergovské hmoty zabývá, je překvapivě nepočetná. Autorovi není známo, že by k problematice existovala jakákoliv souhrnná monografie nebo že by se konaly workshopy – veškerým zdrojem informací jsou tedy jen sporadické články.

Vzhledem k rozsahu a povaze dosavadních znalostí byla pro teoretické bádání k této dizertaci zvolena strategie důkladného prozkoumání zvolených základních vlastností rydbergovské hmoty, o kterých byla důvodná domněnka, že se jimi ještě nikdo nezabýval. Těmi jsou difrakce na rydbergovské hmotě, aplikace metody lineární kombinace atomových orbitalů na nejmenší cluster tvořený atomárním vodíkem a působení speciálního elektrostatického pole na částici s permanentním elektrickým dipólem; poslední jmenovaný okruh tvoří pojítko mezi původní autorovou prací coby doktoranda – vznikla pro studium vodíku a antivodíku a je aplikovatelná na libovolnou částici s permanentním elektrickým dipólem, otázka přítomnosti permanentního elektrického dipólu u clusterů rydbergovské hmoty je ale neobjasněná. Původnímu užšímu tématu dizertace, tedy rydbergovským atomům vodíku, resp. antivodíku v křížných polích a v experimentu AEGIS se věnuje poslední kapitola této práce. Popis a odvozování vyjmenovaných vlastností obsahuje řadu elementárních úkonů, z nichž některé jsou prostou rekapitulací zjištění základních kurzů daných oborů, autor ale vymezuje svoje původní ideje a závěry v závěru práce.

Tělo textu tvoří pět hlavních kapitol:

- První kapitola je rešerší o rydbergovské hmotě shrnující poznatky z odborných článků. Obsahuje informace jak modelově-teoretické, tak i experimentálně-observační, a také některé hypotézy nebo nejednoznačně formulované myšlenky, které by ale mohly být důležité v budoucnu pro ty, kteří by se tématem chtěli zabývat a chtěli vycházet z této práce. Všude, kde to bylo možné, jsou citovány zdroje těchto poznatků. Autor zvolil pojetí, které jde hodně do šíře a které pojednává o většině jemu známých a ucelenějších fyzikálních okruzích týkajících se rydbergovské hmoty, ke konci kapitoly jsou pak shrnuty ty poznatky, které nakonec byly významné pro samotnou dizertaci. U nejdůležitějších pojmů je uveden i jejich anglický ekvivalent.
- Druhá kapitola je můstkem od původního bádání o fyzice vodíku, respektive antivodíku v rámci kolaborace experimentu AEGIS v CERNu¹ k rydbergovské hmotě. Autor ve své diplomové práci [1] předložil kvaziklasický model pro pohybovou rovnici takového (anti)atomu ve vnějších křížných elektrických a magnetických polích. Pro speciální případ elektrostatického pole² našel v rámci tohoto modelu během doktorského studia takovou konfiguraci elektrod (co do geometrického tvaru), která určitou třídu částic s permanentním elektrickým dipólem zachytí³. Atom vodíku může mít permanentní elektrický dipól, jak koneckonců demonstruje Starkovo štěpení spektra prvního řádu, ale většina odvození je obecná a použitelná tedy i pro jakoukoliv částici s elektrickým dipólem. Těžiště výpočtů v teoretické části této kapitoly tvoří tato trojice:
 - volba válcové konfigurace elektrod a doložení, že potenciální energie dipólové částice v prostoru mezi nimi je úměrná převrácené hodnotě radiální válcové souřadnice
 - separace pohybových rovnic na pohyb bezsilový a pohyb keplerovský
 - a konečně efektivní parametrizace počátečních podmínek na dvojici proměnných (sinus "náštrelného" úhlu a poměr potenciální a kinetické energie částice na počátku pohybu) a nalezení akceptance pasti (kritérií zachycení) jako přesně vymezené plochy v diagramu těchto dvou proměnných

¹experiment snažící se o produkci, zachycení a měření vlastností atomů neutrálního antivodíku, v první jeho fázi pak především o změření jeho gravitačního zrychlení v zemském tíhovém poli

²a s několika dalšími dílčími předpoklady

³třída je dána podle počátečních podmínek pohybu, kvantového stavu částice a parametrů pasti

Přesné řešení pohybu je doplněné numerickým. Autor práce spoluprvy vytvořil počítačový program pro simulaci pohybu dipólové částice v elektrickém poli zadaném tzv. mapou. Jedná se o integraci typu Runge-Kutta. V této kapitole je detailněji probrána část algoritmu, která zodpovídá, aby lokální interpolace mapy pole byla spojitá až do první derivace včetně (a se zdůvodněním, proč je toto u dipólové částice nutné). Interpolace byla testována na třídě přesných partikulárních řešení Poissonovy rovnice v cylindrických souřadnicích, které byly pro tyto účely nalezeny. Stručně se tedy numerická část první kapitoly soustředí na následující:

- nalezení schématu lokální interpolace pole zadaného podle mapy tak, aby byla spojitá do první derivace včetně
 - nalezení několika přesných partikulárních řešení Poissonovy rovnice ve válcových souřadnicích
- Třetí kapitola se zabývá difrakčním spektrem rydbergovské hmoty. Každý cluster rydbergovské hmoty lze chápat jako periodické uspořádání atomů na velmi krátké vzdálenosti; o takových je známo⁴, že mohou za vhodných podmínek mít difrakční spektrum⁵, což je de facto Fourierův obraz přímé mříže nebo (ekvivalentně) mapa mříže reciproké. V případě difrakce na clusterech rydbergovské hmoty naráží analýza na obtíž, že clustery jsou dvourozměrné objekty v třírozměrném prostoru, jejich reciproká mříž tedy bude určitým způsobem degenerovaná a to ztěžuje nalezení podmínek, za kterých je difrakční spektrum netriviální. Některé takové podmínky jsou nalezeny a popsány na základě vlastností rydbergovské hmoty vyjmenovaných v první kapitole. Většina třetí kapitoly je věnována konstrukci (degenerované) reciproké mříže rovinného clusteru v třírozměrném prostoru, a to hned několika způsoby; více metod bylo použito, protože se vzájemně doplňují; navíc, jak se ukázalo právě až během samotné konstrukce, určitá třída funkcí dvou proměnných s hexagonální symetrií lze napsat v periodickém (Fourierově) rozvoji velmi elegantním, úsporným a neobvyklým způsobem. Protože jsou clustery ”velmi konečné”, je pro popis reflexí zkonstruován vhodnější popis než jinak v pevných látkách obvyklé Millerovy indexy, podle něhož jsou k reflexím počítány i multiplicity. Hlavními výsledky kapitoly tedy jsou:

- konstrukce reciproké mříže pro případ dvourozměrné hexagonální symetrie

⁴např. krystalky pevné látky o velikosti jen několika atomů nebo i přechodně existující pravidelné struktury v kapalinách

⁵rozdíl oproti dokonalému nekonečnému krystalu stejného uspořádání by byl jen v šířkách difrakčních píků

- vyslovení hypotézy o možnosti speciálního typu algebraického rozkladu pro určitou třídu funkcí dvou proměnných s hexagonální symetrií a jeho explicitní doložení na dvou vybraných funkcích významných pro studium difrakce na rydbergovské hmotě
 - návrh značení rovin odlišného od Millerových indexů; určení multiplicit reflexí
 - nalezení takových podmínek, kdy lze pro rydbergovskou hmotu získat netriviální difrakční spektrum, a jeho kvantifikace
- Čtvrtá kapitola se zaměřuje na spektrum stavů clusteru rydbergovské hmoty. Unikátnost řešení spočívá v neobvyklém rysu, že zkoumaný objekt výrazně mění velikost při přechodech mezi povolenými stavy a s tím i vzájemné silové působení mezi konstituenty. Na rozdíl například od izolovaného atomu vodíku tedy je nemožné nebo nepřehledné znázornit všechny vlnové funkce a jim odpovídající energetické hladiny do jednoho univerzálního potenciálu. Pro demonstraci tohoto jevu je zkonstruován ilustrativní model částice v jednorozměrném potenciálu konečné hloubky a o proměnné velikosti, který má kvalitativně stejný rys. Samotné studium spektra rydbergovské hmoty je zaměřeno na nejmenší cluster o sedmi atomech vodíku, tedy po jednom v každém ze sedmi uzlů, na který je aplikována metoda lineárních kombinací atomových orbitalů (Linear Combination of Atomic Orbitals, LCAO). Ze všech vlnových funkcí atomu vodíku (tj. přesných řešení) jsou vybrány ty, které mají velký⁶ moment hybnosti, a tedy i maximálně rovinnou povahu; u nich je ukázáno, že mají jednoduchý a kompaktní algebraický tvar; a jejich posloupnost podle hlavního kvantového čísla n je pečlivě aproximována funkcemi ještě jednoduššími (a řádně normalizovanými) pro snazší odhad coulombických a překryvových integrálů. Pro účely těchto integrálů je nalezen také způsob, jak pro tyto náhradní funkce počítat maticové elementy. Při uvážení interakce elektronů jen se sousedními jádry⁷ a ignorování vzájemné interakce elektronů, jejich spinů a nutnosti výslednou elektronovou funkci antisymetrizovat vede metoda LCAO na maticovou Roothaanovu rovnici. Přestože prvky této čtvercové matice o sedmi řádcích a sloupcích jsou závislé na parametrech, jsou přesně nalezeny všechny její vlastní vektory. S jejich pomocí je pak vypočítána i energie clusteru pro dané n v závislosti na coulombických a překryvových integrálech, které jsou díky konstrukci aproximovaných vodíkových vlnových funkcí vyčísleny (samozřejmě opět v závislosti na n) jako objemy jejich geometrických průniků. Na závěr je

⁶dokonce nejvyšší možný

⁷tj. těmi, které mají od mateřského jádra daného elektronu vzdálenost právě okamžité (na n závislé) mřížkové konstanty clusteru

naznačena myšlenka, jak se k výsledku dopracovat i metodou kvantových defektů (quantum defects), pokud by se mírně opravila představa modelu clusteru rydbergovské hmoty. Hlavními mezníky kapitoly tedy jsou:

- nalezení spektra v ilustrativním modelu jednorozměrné potenciálové jámy konečné hloubky s velikostí proměnnou podle kvantového stavu
 - konstrukce modelu aproximujícího vodíkové vlnové funkce s vysokým momentem hybnosti, normalizace těchto náhradních vlnových funkcí a nalezení nejvhodnějšího způsobu výpočtu jejich maticových elementů
 - sestavení soustavy rovnic podle metody lineární kombinace atomových orbitalů (LCAO) a nalezení přesných vlastních vektorů a energie stavu clusteru s daným n v závislosti na prvcích matice soustavy
 - výpočet překryvových a coulombických maticových elementů (integrálů) jako geometrického průniku zkonstruovaných náhradních vlnových funkcí
 - návrh alternativního modelu rydbergovské hmoty, pro který by šla aplikovat metoda kvantových defektů (quantum defects)
- Pátá kapitola se vrací k autorovu nejstaršímu bádání v době doktorského studia. Navazuje na jeho diplomovou práci, ve které předložil pohybovou rovnici vodíku, resp. antivodíku v křížných polích (tj. v polích elektrických a magnetických přítomných zároveň), kterou novým způsobem stručně představuje. Část textu je také věnována popisu experimentu AEGIS, kterého se autor účastnil. Autor v návaznosti na kapitolu 2 této práce našel takové přesné partikulární řešení Poissonovy rovnice ve válcových souřadnicích, které umožní modelově zkoumat možnosti podélného urychlení atomů tímto polem. Pro pohyb antivodíku v křížných polích válcové symetrie se autor spolupodílel na tvorbě simulačního programu, který je stručně popsán. Výsledky vybraných simulací jsou demonstrovány a na jejich základě jsou vyslovena tvrzení o obecných zákonitostech pohybu atomů antivodíku v reáliích experimentu AEGIS, která pro něj mohou být klíčová. Simulační program byl předán k užívání mladším studentům zabývajícím se pohybem atomů v polích v rámci vlastního výzkumu. Nejdůležitějšími počiny v této kapitole popsanými tedy jsou:
 - stručné představení pohybové rovnice atomu vodíku, resp. antivodíku v křížných polích, kterou autor navrhl, experimentu AEGIS, kterým především byla motivována, a simulačního programu pro řešení uvedené rovnice

- konstrukce přesného řešení Poissonovy rovnice pro účely modelového studia možností urychlení atomů elektrostatickým polem
- demonstrace vybraných simulací a vyslovení závěrů důležitých pro experiment AEGIS

Filozofie výkladu v textu práce vychází z autorových zkušeností coby vyučujícího. Spíše než stručnost volí autor takový popis, aby byly výpočty po technické stránce jasné, aby čtenář se zájmem o problematiku byl poučen o základních zákonitostech, postupech a pojmech přímo v této práci (aniž by tedy kvůli tomuto musel nutně studovat i další literaturu) a aby komentáře pokryly většinu nejasností, které by u čtenářů mohly nastat. Vybrané dílčí výpočty jsou nabídnuty více postupy a některé výsledky jsou konfrontovány s předem známými vlastnostmi.

Práce je napsána s následujícími konvencemi:

- V celé dizertaci se pouze jediná zkratka vyskytuje víc než jednou⁸, a sice:
 - LCAO – Linear Combination of Atomic Orbitals, metoda lineární kombinace atomových orbitalů
- Celá práce se důsledně drží soustavy SI. V některých případech se ale přistupuje k úspornému vyjádření pomocí vhodných bezrozměrných veličin a konstant, například u Rydbergovy konstanty atomu vodíku

$$R_{\infty} = \frac{e^2}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar c} = \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2, \quad (0.1)$$

kde α je konstanta jemné struktury a $m_e c^2$ je klidová energie elektronu. Redukovaná Comptonova vlnová délka elektronu je pak v celé práci značena jako

$$\Lambda_C \equiv \frac{\hbar c}{m_e c^2} \quad (0.2)$$

a Bohrovův poloměr se někdy rozepisuje jako

$$a_0 = \frac{\Lambda_C}{\alpha}. \quad (0.3)$$

⁸AEGIS je spíše akronym

Pokud se symbol m ve smyslu hmotnosti vyskytuje bez indexu, je pod ním míněna vždy hmotnost elektronu⁹; podobně M bez indexu značí hmotnost celého clusteru rydbergovské hmoty¹⁰.

- V práci je energie značena jako W pro odlišení od velikosti elektrické intenzity $E = |\vec{E}|$, se kterou se často vyskytuje v jednom vzorci.
- Vektor jako n -tice reálných nebo komplexních čísel je chápán ve sloupcovém tvaru. Pro jeho prostorově úspornější řádkový zápis se přistupuje k transpozici, tedy:

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix} = (a_1, a_2, \dots, a_n)^T \quad (0.4)$$

- Taylorův rozvoj funkce f okolo bodu x_0 do n -tého řádu polynomu se značí jako

$$T_{f,x_0,n}(x) \left(= \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} \cdot \frac{\partial^k f}{\partial x^k} \Big|_{x=x_0} \cdot (x - x_0)^k \right), \quad (0.5)$$

kde se konvenčně dodefinovává $0^0 = 1$.

- V práci není nikde užito Einsteinovy sumační konvence, tedy například ve výrazu $n_G e^{iGx}$ se přes G nesčítá, naopak v $\sum_G n_G e^{iGx}$ ano.
- Symbolika se středníkem v argumentu funkce, např. $n(\vec{r}; \vec{G})$, znamená, že výrazy před středníkem jsou formálně proměnné funkce a za ním jsou parametry.
- Argumenty funkcí s výjimkou Diracovy delta funkce/distribuce jsou konstruovány jako bezrozměrné.
- Diracova delta funkce (distribuce) $\delta(x - x_0)$ je zobecněná funkce nulová všude kromě x_0 , pokud $\int_{\mathbb{R}} \delta(x - x_0) dx = 1$; bod nespojitosti x_0 nechť je nazýván uzlem delta funkce. Pod Diracovým hřebenem (Dirac comb) se rozumí součet Diracových delta funkcí s uzly obvykle rozmístěnými s určitou pravidelností, a to jak konečně mnoha, tak nekonečně (spočetně) mnoha.

⁹symbol m je místy použit i pro magnetické kvantové číslo, k záměně by ale nemělo docházet

¹⁰symbol M je také použit pro označení bezrozměrného parametru v algoritmu pro výpočet multiplicit, hmotnost atomu (anti)vodíku nebo pro hmotnost nespecifikované částice v modelové potenciálové jámě; ani tam by k záměně dojít nemělo

- Řezem funkce dvou proměnných je myšleno zúžení definičního oboru (např. roviny $x-y$) na přímku – řez je tedy v principu funkce jedné proměnné odečítané podél této přímky.
- O funkci $f(x, y)$ dvou proměnných se prohlásí, že je hexagonálně symetrická s periodou $a > 0$, pokud je invariantní k pootočení o libovolný násobek úhlu $\frac{\pi}{3}$ okolo počátku $(0, 0)^T$ a pokud je a nejmenší mezi periodami všech řezů funkce přímkami procházejícími počátkem. Některé funkce lze učinit hexagonálně symetrickými s periodou a prostým vhodným posunutím počátku. V této práci se pod hexagonálně symetrickou funkcí s periodou a bude rozumět i taková funkce, která – při splnění ostatních požadavků – je periodická jen na nějaké omezené oblasti okolo počátku¹¹. Jedná se o zobecnění pojmu sudá a -periodická funkce jedné proměnné¹². Směry rovnoběžné s těmi, ve kterých je perioda právě a , se nazývají hlavní směry (hexagonální) symetrie.
- Pro hexagonálně symetrický Diracův hřeben s periodou a lze rovinu rozdělit na tzv. Wigner-Seitzovy buňky podle toho, ke kterému z uzlů, kde je hřeben nenulový, je daný bod nejbližší. Buňku tvoří pravidelný šestiúhelník o straně a (resp. a_n , je-li mřížková konstanta proměnná se stavem n) s uzlem delta funkce uprostřed.

¹¹a jinde například nulová

¹²resp. sudá funkce s periodou a alespoň v určité části definičního oboru

Kapitola 1

Rydbergovská hmota

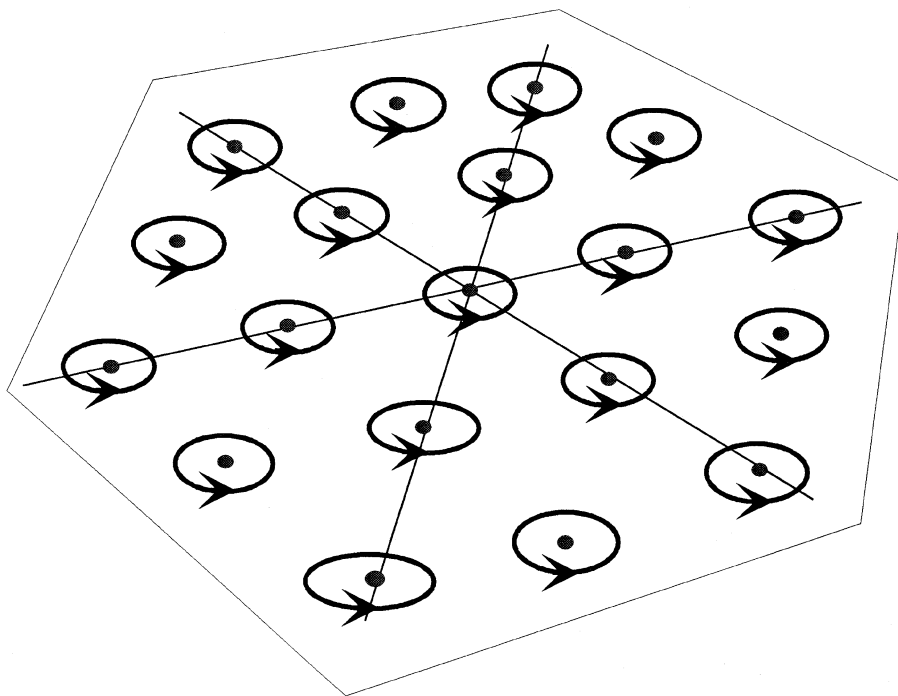
Rydbergovská hmota (Rydberg matter) je zvláštní fáze běžné (baryonové) látky tvořená vysoce vzbuzenými atomy nebo molekulami. U autorů, kteří se takto chápánou substancí nezabývají (a možná ji ani neznají), se lze setkat s užitím tohoto termínu obecněji pro jakýkoliv atom, molekulu nebo jejich soubory vzbuzené do vyšších, tzv. rydbergovských stavů (Rydberg states), text této práce se ale drží vymezení, že se jedná o specifický stav hmoty s vlastnostmi, který ne každý soubor rydbergovských atomů nebo molekul musí mít. Popisu těchto charakteristik se věnuje tato kapitola. Vedle označení rydbergovská hmota se pro uvažovanou fázi řidčeji vyskytuje i pojmenování rydbergovská substance (Rydberg substance [2]) nebo kondenzované excitované stavy (condensed excited states, CES [3, 4]).

Prvně byla rydbergovská hmota předpovězena kolem roku 1980 [5, 6] a experimentálně potvrzena v devadesátých letech dvacátého století [5]. Bádání o této substancí, byť experimentálně potvrzené a otevírající obrovské pole pro bádání od interpretace mnohých přírodních jevů po technické aplikace, je ale v současnosti na periférii zájmu; pravidelně publikujících autorů je hrstka, kromě izolovaných článků podle všeho neexistuje žádná monografie, která by dosavadní poznatky shrnovala, a autorovi práce není známo, že by se k tématu konaly nějaké konference nebo workshopy; východiskem dizertace byly pouze články.

1.1 Přechod vzbuzeného plynu do kovového stavu; clustery

Průkopnická myšlenka ("Transition of an excited gas to a metallic state" [6]), která koncept rydbergovské hmoty vytvořila, vycházela z představy, že je-li v určitém ob-

jemu dané množství izolovaných atomů (nebo molekul či iontů) a zvyšují-li tyto atomy svůj kvantový stav, nemění se sice hustota plynu (popř. plazmatu) jako celku, ale atomy se dostávají do stále těsnějšího kontaktu prostřednictvím elektronových orbitalů – vzbuzené (rydbergovské) stavy atomů, obzvláště alkalických, zvyšují svoje poloměry typicky s kvadrátem hlavního kvantového čísla n . V jazyku těchto poloměrů by vzájemná vzdálenost mezi sousedními atomy rovná dvojnásobku jejich poloměru přirozeně odpovídala těsnému kontaktu. Teoretické výpočty ukázaly, že počínaje určitou kritickou vzájemnou vzdáleností rovnou zhruba trojnásobku zmíněného poloměru přestávají být atomy navzájem izolované a začínají svoje (valenční) elektrony sdílet, podobně jako je tomu v kovech – odsud i titul "Transition of an excited gas to a metallic state" [6]. O tomto jevu se hovoří jako o kondenzaci [7] a pro takovéto těsné uspořádání atomů byl zvolen název rydbergovská hmota. Až později [3] se ukázalo, že za určitých podmínek může v takto kondenzované rydbergovské hmotě dojít k dalšímu přeuspořádání (další kondenzaci), při kterém se vytvářejí samostatné clustery (clusters). Ty sice mohou mít různé velikosti a tvary [2, 3], ale zdaleka nejčastější a nejvýznamnější jsou ty, které jsou rovinné a mají hexagonální symetrii – uspořádání atomů v něm znázorňuje Obr. 1.1.



Obr. 1.1: Rovinný hexagonální cluster rydbergovské hmoty. Šipky symbolizují tzv. kruhové stavy. Převzato z [4].

Tyto rovinné hexagonální clustery jsou elektricky neutrální [2], na množství atomů, ze kterých se skládají, poměrně nepočtené, ale vlivem vysokého rydbergovského stavu atomů velmi rozlehlé co do velikosti, někdy až makroskopické. Clustery jsou vůči spontánní deexcitaci a fotodeexcitaci vysoce stabilní; přesněji se o clusterech (ale i o rydbergovské hmotě bez clusterů) hovoří jako o metastabilní kondenzované fázi [3] – o metastabilitě bude ještě pojednáno dále. Vnitřek clusteru lze formálně rozdělit na Wigner-Seitzovy buňky [3] podle uzlů. Clustery jsou co do kovové povahy blízké rydbergovské hmotě před jejich vznikem. Jako rydbergovská hmota se vedle kondenzovaného uspořádání atomů popsaného v předchozím odstavci označuje také samotný cluster, popř. velký oblak (cloud) clusterů [8] – předpokládá se, že dojde-li ke vzniku clusterů, bude se většina rydbergovské hmoty nacházet právě v tomto uspořádání¹. Vzácně se místo pojmu cluster používá termín sheath [4]. Počínaje následující kapitolou se pod rydbergovskou hmotou bude rozumět hexagonální cluster nebo jejich oblak.

Je přirozené, že výskyt velkých vysoce vzbuzených atomů a molekul, a tedy i rydbergovské hmoty, je limitováno na oblasti s vysokým vakuem [4]. Rydbergovská hmota ve formě clusterů nebo bez nich je energeticky výhodnější než izolované atomy [7]. Rydbergovská hmota lze připravit uměle v laboratoři, ale pravděpodobně se vyskytuje i přirozeně – podmínky a příklady obojího budou následovat.

1.2 Rydbergovská hmota jako zvláštní fáze látky

Pravidelnost uspořádání clusterů může vyvolat důvodné očekávání, že objekt bude mít určité pevnolátkové (či dokonce přímo kovové) vlastnosti, zatímco malý počet atomů v každém z nich vede k domněnce, že se jejich velký soubor (oblak) bude chovat jako plyn velkých molekul². Teoretické výpočty a experimentální měření ale ukazují, že i když některé pevnolátkové a plynové vlastnosti rydbergovská hmota vykazuje, tak soubor jejích vlastností jako celek z ní činí substanci natolik specifickou, že je na místě chápat ji jako novou fázi (stav) hmoty³.

Typickými kovovými vlastnostmi, kterými se rydbergovská hmota vykazuje⁴, jsou například plazmová frekvence elektronů [9], sdílení elektronů vícero atomy [6], kolektivizace pohybů blízkých atomů [3], nebo elektronická struktura vodivostních pásů [10] a jako naopak typicky nekovové jsou jmenovány průhlednost rydbergovské hmoty ve vidi-

¹i když asi nic v principu nebrání koexistenci různých kondenzovaných forem

²rydbergovská hmota bez clusterů je naopak připodobňována ke kapalině [7]

³podobně jako Bose-Einsteinův kondenzát, kvark-gluonové plazma, spinové sklo nebo látku v supratekutém stavu

⁴v jednoduše kondenzované formě i u clusterů

telné oblasti spektra [3], plasticita [3], neobsazenost nižších stavů elektrony [3]⁵, nehomogenní výskyt elektronů [3]⁶, silná vzájemná korelace mezi elektrony [5], jejich vysoký moment hybnosti [10] a nekonstantnost mřížkové konstanty vůči vnitřním procesům [11]⁷; konečně typicky plynovou vlastností je např. nízká hustota [2, 3]. Autoři rydbergovskou hmotu také často připodobňují k prachovému plazmatu (dusty plasma) [10] nebo k vodivostním částicím v polovodičích [2], ale většinou o ní píší jako o "téměř kovové" [5, 9, 10].

Rydbergovská hmota by měla jakožto fáze mít své místo ve fázovém diagramu [11] a mimo jiné by měla být jasně odlišitelná například od přehřáté páry [11]. Clustery se mohou vyskytovat buď samostatně volně, tedy jako v ideálním plynu, nebo se mohou řetězit do jakýchsi vláken (columns). Druhé jmenované uspořádání může za určitých podmínek mít obrovskou hustotu (ultradense Rydberg matter), až $\sim 1.3 \cdot 10^{+8} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ [12, 13], a někteří autoři jej pak považují za fázi hmoty odlišnou od běžné rydbergovské (mělo by tedy v rámci rydbergovské hmoty docházet ke třetímu typu kondenzace). Rydbergovská hmota o takovýchto vlastnostech se údajně dá laboratorně připravit pod vlivem magnetického pole v pórech Fe_2O_3 a mohla by být slibným předmětem studia obzvláště pro termojadernou fúzi [12, 13]. Ultradense Rydberg matter je zmiňována, pouze je-li tvořena deuteriem, hovoří se tedy také o ultradense deuteriu [12]; někteří autoři ve fázovém přechodu k ultradense deuteriu spatřují Bose-Einsteinovu kondenzaci deutronové tekutiny [12]. Obě zmíněné konfigurace se mohou vyskytovat i zároveň ve směsi [12].

1.3 Energetická struktura rydbergovské hmoty

Nejčastější [5] hexagonální symetrie rovinných clusterů je energeticky nejúspěšnější až od určitého kvantového stavu počínaje [3] – pro nižší stavy je pravděpodobnější výskyt rydbergovské hmoty bez obecného uspořádání. Takový cluster je tvořen jedním centrálním uzlem a okolo něj dalšími v násobcích šesti. V uzlu se může nacházet buď iont atomu – prokázáno pro atomy vodíku [5, 7], draslíku [3, 8] a cesia [2, 3, 4, 7, 14] (u kterého byla rydbergovská hmota historicky prvně doložena [4]), hovoří se i o sodíku [10] –, nebo molekuly, nejčastěji se v této souvislosti píše o molekule H_2 [3, 8, 14], která by pak mohla být významná i v astronomickém měřítku [3, 5], a o molekule N_2 [8, 15]. Hovoří se i o smíšených clusterech tvořených atomy vodíku v některých uzlech a molekulách

⁵toto by mělo mít jen malý vliv na fyzikálně-chemické vlastnosti, naopak velký na dobu života

⁶pravděpodobnost výskytu u hranic Wigner-Seitzových buněk je vysoká, u jader naopak zanedbatelná

⁷poslední dvě jmenované vlastnosti budou v této práci obzvláště významné

vodíku v jiných, případně i za účasti hélia [14]⁸. Hexagonální pravidelnost a symetričnost implikuje, že se rydbergovská hmota vyskytuje jen při specifických počtech uzlů, kterým se říká magická čísla (magic numbers) – pozorovány byly clustery s magickými čísly 7, 19, 37, 61 a 91 [4, 5, 9, 15], které všechny odpovídají šestiúhelníkům; z experimentálních dat lze ale interpretovat i výskyt čísel 10 a 14 [5, 9], což hexagonální strukturu neodpovídá; a předpovězeny byly také clustery tvarů neúplných šestiúhelníků, ale stále se šestičetnou symetrií, s ”polomagickými” čísly 13, 31, 55 a 85 [4].

Rovinné uspořádání clusteru je jediné, které bylo dosud experimentálně potvrzené [15]. Kromě své energetické výhodnosti vůči jiným uspořádáním [5, 11]⁹ jej pravděpodobně upřednostňuje také fakt, že stavy atomů s vyšším momentem hybnosti, a tedy ”více rovinné”, mají delší dobu života a kondenzace do clusteru se mohou dožít [15]. Je-li pohyb elektronů v těchto clusterech rovinný, blíží se klasickému popisu podle principu korespondence a pro popis clusteru lze použít semiklasické metody na rozhraní kvantové a klasické fyziky [3, 4, 16]¹⁰. Semiklasické elektrony s vysokým momentem hybnosti (circular (Rydberg) states) [3, 9, 8] jsou (vlivem korelace [4]) v clusteru sfázovány co do pohybu, což zesiluje vazbu v clusteru [4]. Cluster ještě více stabilizuje, jsou-li všechny elektrony ve stavu se stejným kvantovým číslem n ¹¹. V kvantovém pohledu je pak cluster stabilizován, jsou-li elektrony koncentrovány hlavně podél hranic Wigner-Seitzových buněk¹² [3, 11].

Kromě pravidelného hexagonálního uspořádání a rovinné povahy je třetí klíčovou charakteristikou rydbergovské hmoty, která jí koneckonců dává i jméno, skutečnost, že atomy tvořící clustery se nachází ve vysoce vzbuzeném (tzv. rydbergovském) stavu [5, 10]. Vysoce vzbuzený stav umožňuje¹³ i vysoký moment hybnosti elektronů, které se pak mohou více a více lokalizovat do roviny, jak je známo například ze studia orbitalů atomu vodíku. Dvěma přímými důsledky vysokého rydbergovského stavu atomů, a potažmo tedy i clusterů rydbergovské hmoty, jsou jejich neobyčejná velikost a dlouhá doba života vzbuzených stavů [3, 5, 9, 10].

Platí, že atomy v rydbergovských stavech jsou prostorově rozměrné – u atomu vodíku v Bohrově modelu roste poloměr orbity kvadraticky s hlavním kvantovým číslem n jako

$$r_n = a_0 n^2 = \frac{\Lambda_C}{\alpha} n^2, \quad (1.1)$$

⁸u těchto smíšených už se lze důvodně domnívat, že by cluster mohl mít permanentní elektrický dipól

⁹rovinná struktura také nejrychleji vzniká

¹⁰obvykle se uvažuje, že každý z elektronů je na kruhové dráze okolo svého mateřského iontu [4]

¹¹pak toto kvantové číslo může popisovat i cluster jako celek

¹²což semiklasické představě elektronů na kruhových orbitách neodporuje

¹³ale nevynucuje

kde $a_0 \cong 5.291772 \cdot 10^{-11}$ m [17] je Bohrov poloměr, $\Lambda_C = \frac{\hbar c}{m_e c^2}$ (redukovaná) Comptonova vlnová délka elektronu a $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ konstanta jemné struktury. Aby byla udržitelná myšlenka pravidelného rovinného uspořádání a zároveň růstu velikosti každého atomu v clusteru s kvantovým číslem n , musí mít tento kvantový stav všechny atomy clusteru stejný [5, 8, 11], což je v souladu se stabilitou clusteru diskutovanou výše, a při změně kvantového stavu clusteru jako celku ho kolektivně měnit¹⁴.

Velikost clusteru rydbergovské hmoty úměrnou n^2 experiment potvrzuje; při těsném uspořádání by vzdálenost mezi sousedními uzly (tedy de facto zmíněná mřížková konstanta) měla být o něco málo větší než $2a_0n^2$, z experimentů [8, 10] plyne vzdálenost

$$a_n \cong 2.9a_0n^2. \quad (1.2)$$

Neobvyklou vlastnost, že je v rydbergovské hmotě mřížkový parametr závislý na vnitřním kvantovém stavu, zde zdůrazňuje index n . Největší clustery rydbergovské hmoty mohou mít i makroskopické rozměry, více jak mikrometr [5]; tato velikost spolu s konečnou rychlostí šíření informace je někdy považována za důvod omezení počtu uzlů, které mohou rydbergovskou hmotu tvořit.

Dlouhá doba života (již zmíněná stabilita vůči foto- a spontánní deexcitaci) je dána jednak velmi malým překryvem mezi vlnovými funkcemi různých vzbuzených stavů [9], jednak nutností elektronů tunelovat potenciálovou bariérou okolo hranic Wigner-Seitzových buněk [12] a pravděpodobně i výběrovými pravidly; podstata metastability ale tkví v tom, že na rozdíl od běžných kovů mají vzbuzené stavy elektronů kam deexcitovat, jelikož nižší stavy jsou v rydbergovské hmotě neobsazené [7]. Pokud k deexcitaci přeci jen dochází, pak se tak směrem k základnímu stavu děje po kaskádě [16]. V praxi je doba života stavů v laboratorních podmínkách, tj. při vystavení vzájemným srážkám a jiným, v řádu minut [3], teoreticky pro kvantové stavy $n \cong 16$ vychází doba života asi sto let [5] a pro kvantový stav okolo osmdesáti už ale může být srovnatelná s dobou života vesmíru [5, 9]. Laboratorně byly pozorovány vícefotonové procesy, které dobu života výrazně zkracují, mimo laboratoř ale v oblastech, kde se rydbergovská hmota podle všeho vyskytuje, lze tyto mechanismy zanedbat [5, 9]. Augerovské procesy (Auger process)¹⁵, které by teoreticky mohly dobu života taky zkracovat, jsou ale autory zmiňovány jen v souvislosti se samostatnými rydbergovskými atomy před kondenzací do rydbergovské hmoty [3].

¹⁴to je podstatný rozdíl oproti pevným látkám, popř. kovům, které mají sice také periodické uspořádání, ale tato perioda je na vnitřním stavu elektronů nebo na vnějším tlaku v podstatě nezávislá

¹⁵při srážce dvou rydbergovských atomů se jeden ionizuje a druhý přejde nezářivě do základního stavu

1.4 Vznik a detekce rydbergovské hmoty; spektrální vlastnosti

Rydbergovská hmota podle experimentálních zjištění nepotřebuje pro svůj vznik nijak zvláštní podmínky, pokud jde o teplotu, tlak, chemické složení a jiné [5, 10]. Má se za to, že v dostatečném vakuu vzniká přirozeně evaporací/desorpcí substrátu z povrchů [4, 5, 8, 10, 14, 15] nebo v povrchové vrstvě zbytkové atmosféry (boundary surface layer) [3, 5, 8, 9, 15], pokud jsou atomy v něm vzbuzené [9]; kondenzací možná spouští van der Waalsovská vzájemná polarizace vzbuzených atomů [3]. Substrát, ze kterého se rydbergovská hmota desorpcí tvoří, nemusí být nutně na povrchu – popsána byla i úspěšná interkalace draslíku do grafitu pro tyto účely [4]. Takové podmínky jsou mimo laboratoř dosažitelné například v mezihvězdných oblacích nebo ve vysokých vrstvách atmosféry, jsou-li v těchto přítomna například prachová nebo jiná zrna s vhodným povrchem [9]; jsou i názory o výskytu rydbergovské hmoty v prstencích planet (například Saturnu) nebo v ohonech komet [10].

Kromě už zmíněné desorpce z povrchu nebo z interkalačních vrstev se jako o mechanismech, které mohou vést k tvorbě rydbergovské hmoty (ale v laboratorní praxi se podle všeho zatím nepoužívají), píše také o přechodu v chladném neideálním plazmatu ((ultra)cold neutral plasma, také nonideal low-temperature plasma) [3] nebo o excitacích rydbergovských atomů laserem, přičemž část autorů poslední jmenovanou metodu považuje za slibnou [3], jiní naopak za minimálně neefektivní [15].

Laboratorní prokazování přítomnosti rydbergovské hmoty vychází primárně z jejího pravidelného uspořádání daného magickými čísly – magická čísla se jednak vyskytují v záznamech hmotnostních (time-of-flight) spektrometrů [4, 8, 10, 15] a jednak jsou specifické momenty setrvačnosti clusterů pozorovány v rotačních spektrech [10]. Až později se podle všeho začala zkoumat možnost využívat laserů (laser probing) [9], a to nejen k měření samotnému, ale též k zachytávání clusterů do magneto-optických pastí [3], jak bývá běžné v atomové fyzice; speciálně bývá zmiňována Ramanova spektrometrie [3, 8, 9, 14]. Je uváděno, že rydbergovská hmota nemá vibrační přechody v infračervené oblasti [9]. Spektrální vlastnosti získané laboratorně (a přenášené následně k interpretaci meteorologických nebo astronomických dat) se dají shrnout tak, že kromě několika málo pásů v infračervené oblasti [5, 9], které pravděpodobně odpovídají elektronickým přechodům, rotačních spekter v mikrovlnné oblasti a limity plazmové frekvence je rydbergovská hmota k elektromagnetickému záření jinak netečná.

1.5 Rydbergovská hmota ve vesmíru

Právě netečnost k záření obrátila pozornost komunity zabývající se rydbergovskou hmotou velmi záhy k astronomickým datům, konkrétně k málo prozkoumaným difúzním pásům (unidentified interstellar bands, také diffuse interstellar bands nebo unidentified interstellar radiation) v infračervené oblasti záření z mezihvězdného prostoru, z nichž většina se dosud nedaří přiřadit k známým atomům, molekulám, komplexům nebo jejich iontům [5]. Tyto pásy jsou velmi rozmanité a mají bohatou substrukturu, soudí se tedy, že jejich původcem je látka s bohatým izotopovým [5] a pravděpodobně také alotropickým zastoupením a zároveň s jinak vysokou fotostabilitou [5]. Někteří autoři si nárokují identifikaci některých těchto pásů s laboratorními daty o rydbergovské hmotě [3, 5, 9, 14]. Tyto pásy jsou pozorovány v podstatě ze všech směrů mezihvězdného prostoru [9], zavádají tedy k domněnce, že se rydbergovská hmota může ve vesmíru vyskytovat v astronomicky významném množství.

Odtud je samozřejmě jen malý krůček k myšlence, že by rydbergovská hmota mohla alespoň z určité části objasňovat otázku takzvané temné hmoty [5, 9], o níž se soudí, že se ve velkém množství vyskytuje v galaxiích, ale se zářením interaguje málo nebo vůbec (proto "temná"). Aby pokryla veškeré odhadované množství, stačilo by, aby měla v mezihvězdném prostoru hustotu 10^8 -krát menší, než jaké je dosahováno v laboratořích [9]. Oblak rydbergovské hmoty podle některých autorů může mít takový tlakový profil, že je do jisté míry rigidní, což by vysvětlovalo i rigiditu rotace spirálních galaxií, pokud by v nich byla rydbergovská hmota přítomna rovnoměrně a ve velkém množství [9].

Nezanedbatelná hustota rydbergovské hmoty v mezihvězdném prostoru by musela být brána v potaz při případných mezihvězdných cestách, protože je podle současných zjištění jak neviditelná, tak i těžko předpověditelná [9]. Pro 10^{15} clusterů v metru krychlovém a rychlosti $v = 0.1 c$ byla vypočtena rovnovážná teplota pohybujícího se objektu s médiem rydbergovské hmoty rovná asi 25000 K [9]. Na známou otázku (Fermiho paradox) "kde [všichni mimozemšťani] jsou?" může být nabídnuta (lehce anekdotická) odpověď: Buď jsou si rydbergovské hmoty vědomi a necestují, nebo cestují velmi pomalu a opatrně, nebo za letu shořeli. [9] Z tohoto pohledu bezproblémové putování sond v rámci sluneční soustavy bývá vysvětlováno kombinací dostatečně nízkých hustot rydbergovské hmoty a nízkých rychlostí družic.

1.6 Uspořádávání clusterů do vláken; magnetické vlastnosti clusterů a jejich srážky

Rovinnost clusterů, ekvivalentní vysokým momentům hybnosti jejich elektronů, dává tušit, že clustery budou mít poměrně velký (permanentní) magnetický (dipólový) moment, kolmo na rovinu clusteru. Tyto magnetické dipóly mohou být zodpovědné za to, že se clustery pravděpodobně uspořádávají do výše zmíněných ohebných vláken a navzájem zesilují magnetické pole podél nich [5, 12] a že je lze zachytit do magneto-optických pastí [3]. Toto magnetické pole může být pro vesmírnou rydbergovskou hmotu i astronomicky významné [5]. Naopak jsou-li clustery umístěny do vnějšího magnetického pole, měly by se uspořádat (ať izolovaně, nebo ve vláknech) podél jeho siločar [5, 13]; clustery se rovněž uspořádávají kolmo vůči laserovému svazku [8]. Díky vzájemným vazbám jsou možná clustery v laboratorních podmínkách v prostoru takřka nehybné [8].

Pokud jde o vzájemné srážky mezi clustery v oblaku rydbergovské hmoty, usuzuje se, že pro vzájemné přibližování clusterů existuje potenciální bariéra, která mimo jiné činí clustery vůči těmto srážkám odolné [5]. Tato potenciální bariéra ale závisí na vzájemné orientaci clusterů a uvádí se, že při vzájemném přibližování rovnoběžných clusterů podél jejich kolmice má křivka potenciálu průběh s lokálním maximem [9]. Konkrétně pro draslíkovou rydbergovskou hmotu v kvantovém stavu $n = 80$ a s 19 atomy v clusteru by toto maximum mělo být na asi $0.66 \mu\text{m}$ [9], což je podle vztahu (1.2) méně, než je vzdálenost mezi atomy v rámci daného clusteru ($0.98 \mu\text{m}$) – vzdálenost mezi clustery ve vlákne by pak mohla být menší než mezi atomy v clusteru¹⁶. Termální srážky jsou ovšem považovány za zásadní mechanismus, jak se v laboratoři rydbergovská hmota může vybudit do vyšších stavů [4, 5, 8]. Pokud se totéž děje i v mezihvězdném prostoru, je soudě podle dat z výše uvedených difúzních pásů typickým kvantovým stavem v termální rovnováze asi $n \cong 80$. K disociaci clusteru může dojít pod vlivem laseru [4]¹⁷ a na clustery nebo rydbergovskou hmotu vůbec má rovněž neblahý vliv přítomnost elektronegativních atomů nebo molekul v jejich blízkosti [2].

1.7 Modelové přístupy k rydbergovské hmotě

Vazba mezi uzly clusteru, která z něj činí (meta)stabilní objekt, je výměnná (exchange-correlation) [5, 10], téměř kovová [5, 7], ale vlákna a oblaky se co do vlastností od kovu významně liší [5]. Cluster jako celek má menší energii než jednotlivé atomy samostatně

¹⁶na tuto myšlenku se bude odkazovat závěr v kapitole o difrakci

¹⁷mechanismem tzv. coulombické exploze

[9]. Existují názory, že pro cluster selhává přístup Born-Oppenheimerovy aproximace [15] a že přesnější by mohla být aproximace inverzní (sic), tj. ionty by se pohybovaly v poli elektronové tekutiny; byla vyslovena domněnka, že v této tekutině se elektrony uskupují do Cooperových párů [12, 13]. Vlastnosti rydbergovské hmoty byly zatím počítány ve třech různých přístupech – kvantovou metodou PDFM (Pseudopotential-Density Functional Method) kombinující pseudopotenciály a funkcionál hustoty [3, 7]¹⁸, semiklasickým přístupem vhodným obzvláště pro rovinné cluster [16] a modelem jellium [4, 15]; ze všech plynou velmi podobné výsledky [15]. Rydbergovská hmota je vůbec považována za objekt na hranici klasického a kvantového popisu světa [3, 4].

1.8 Rydbergovská hmota v zemské atmosféře a v jiných oblastech nebo jevech

Možný výskyt sodíkové [10] rydbergovské hmoty ve vysokých vrstvách zemské atmosféry (mezosféra a termosféra) byl použit k interpretaci některých meteorologických a atmosférických úkazů – noční svítící oblaka (polar mesospheric clouds, noctilucent clouds), anomální radarová echa v mezosféře během polárního léta (polar mesospheric summer echoes, PMSE) a občasné výskyty sodíkových vrstev v atmosféře (sporadic sodium layers) [10] nebo vůbec nízké teploty v mezosféře, která může souviset se samoochlazovací (self-cooling) povahou rydbergovské hmoty [10]. Odebírání vzorků raketami v těchto výškách pravděpodobně působí na rydbergovskou hmotu destruktivně, ale rozvíjí se metodika zkoumání LIDARem [10].

Kromě už zmíněných interpretací temné hmoty a mezosférických jevů pomocí rydbergovské hmoty jsou dalšími fenomény, v souvislosti se kterými je rydbergovská hmota zmiňována, například sonoluminiscence, kulové blesky nebo kovový vodík; mezosférické jevy podle některých mohou zdůvodnit¹⁹ samu homochiralitu zemské biosféry [9, 10]; již byly zmíněny ohony komet, v nichž by se rydbergovská hmota mohla také vyskytovat a poskytnout výklad některých jejich fyzikálních vlastností; a v neposlední řadě se hovoří i o možnosti využít rydbergovskou hmotu jako palivo pro běžné chemické spalování (combustion) [3, 4] a o jejím využití v elektronice [3, 4], optoelektronice [3, 4] nebo v kvantových počítačích [3].

¹⁸využívá se i metody tzv. (efektivních) kvantových defektů (effective quantum defects) [7]

¹⁹cluster se synchronními elektrony mohou odrážet světlo jako kruhově polarizované [9]

1.9 Rydbergovská hmota a lasery

Zvláštní odstavec budiž věnován rekapitulaci (a doplnění), kdy může být pro přípravu, manipulaci nebo studium rydbergovské hmoty užitečný laser: už byly jmenovány různé názory na možnost vybuzení rydbergovských atomů tak, aby kondenzovaly do rydbergovské hmoty; také zkoumání spektrálních vlastností rydbergovské hmoty laserem²⁰; pokusy detekovat rydbergovskou hmotu v zemské atmosféře pomocí LIDARu; náchylnost clusterů na disociaci laserem; a zachytávání do magneto-optických pastí. Lze doplnit, že právě laserem bývají iniciována time-of-flight měření [4, 8] nebo že se objevila myšlenka manipulace s rydbergovskou hmotou v optické mřížce [3].

1.10 Výběr poznatků významných pro tuto práci

Na závěr této kapitoly budou zopakovány ty vlastnosti rydbergovské hmoty, které jsou významné pro tuto práci:

- Rydbergovská hmota je velmi často tvořena rovinnými clustery o hexagonální symetrii – jsou invariantní k pootočení o úhel $\frac{\pi}{3}$. V clusteru je jeden centrální uzel a okolo něj v pravidelné mřížce několik dalších, jejichž počet je násobkem šesti.
- V každém uzlu je buď atom, nebo molekula. Atomy, o kterých je známo (nebo se očekává), že rydbergovskou hmotu tvoří, jsou vodík, sodík, draslík a cesium. V daném clusteru jsou ve všech uzlech atomy nejčastěji stejného izotopu a určité ve stejném kvantovém stavu, takže se daný kvantový stav (n) dá vztáhnout i na cluster jako celek.
- Atomy a clustery se nachází ve vysokém vzbuzeném stavu; vzájemná vzdálenost jader je o něco více než dvojnásobek poloměru atomů, což by odpovídalo těsnému uspořádání jejich bohrovských modelů. Vzájemná vzdálenost uzlů v clusteru roste s druhou mocninou kvantového stavu podle semiempirické formule jako $2.9 \frac{A_C}{\alpha} n^2$; tato vlastnost nemá například u běžných kovů obdobu.
- Clustery jsou stabilní vůči foto- a spontánní deexcitaci, vzbuze stavy mají doby života i mnoho let.
- Vazba mezi atomy v clusteru je podobná jako v kovech. Elektrony, které se vazby účastní, mají ale na rozdíl od kovů vysoké momenty hybnosti, mimo jiné proto je

²⁰včetně Ramanova roztylu

cluster rovinný. Energie clusteru je menší než souboru dílčích izolovaných atomů ve stejném kvantovém stavu.

- Clustery jsou sice dvourozměrné²¹, ale existují v třírozměrném prostoru, kde mohou mít libovolnou orientaci. O velkém množství clusterů v daném objemu se hovoří jako o oblaku. Clustery se mohou řetězit do ohebných vláken, která mohou být zdrojem magnetického pole prostřednictvím jejich magnetických dipólů; a naopak ve vnějším magnetickém poli se clustery a vlákna orientují podél siločar. Vzájemná vzdálenost clusterů ve vláknech může být menší než vzájemná vzdálenost mezi atomy v clusteru.

²¹přesněji dvourozměrně uspořádané, kolmo k rovině určitou šířku co do výskytu elektronů jistě mají

Kapitola 2

Keplerovský pohyb elektrického dipólu; interpolace polní mapy spojitá v první derivaci

Tato kapitola se bude zabývat návrhem elektrostatické pasti pro částice s permanentním elektrickým dipólem. Výchozí motivací je atom vodíku, popř. antivodíku, ale analýza bude platit i pro jiné atomární nebo molekulární objekty, například molekulu vody nebo cluster rydbergovské hmoty, pokud se u tohoto dipól potvrdí¹.

Návrh rozšiřuje rodinu pastí používaných v atomární optice; nejčastěji se lze setkat s magnetostatickými pastmi, např. v tzv. anti-Helmholtzově uspořádání cívek² nebo pastmi založenými na manipulaci atomů s laserem. Past navrhovaná v této kapitole je bližší magnetostatické, protože je založená na neměnném poli, které trajektorie některých částic³ v principu udrží uvnitř určité oblasti autonomně, bez nutnosti jiných zásahů.

Důležitým parametrem pasti je akceptance, tedy podíl úspěšně zachycených částic z celku, popř. prostě kritérium zachycení; jedním z hlavních výsledků kapitoly bude vazba na parametry soustavy ("vnější", například napětí na elektrodách, a "vnitřní", například kvantový stav částice), z níž bude možné pro konkrétní zařízení optimalizovat jeho návrh.

¹např. u smíšených clusterů nebo clusterů z molekul s permanentním dipólem

²zatímco Helmholtzovy cívky jsou protékány proudem souhlasnými směry a generují mezi sebou téměř homogenní pole, při změně směru proudu v jedné z nich je mezi nimi generováno pole téměř nulové a v jeho blízkosti aproximovatelné jako rostoucí lineárně se vzdáleností – na částici s vhodným permanentním magnetickým dipólem pak v této anti-Helmholtzově pasti působí vratná síla a částice může být držena statickým polem

³podle kvantového stavu a počátečních podmínek pohybu v oblasti

Konečně kapitola bude obsahovat popis interpolačního algoritmu pro pohyb dipólové částice v zadaných polích. Pro maximální obecnost byl algoritmus napsán tak, aby řešil pohyb částice v poli zadaném tzv. mapou, tj. určením jeho hodnoty⁴ jen v konečném množství bodů, rozmístěných typicky nějak pravidelně, a následným vyčíslením pole v bodě, kde se právě částice nachází, vhodnou interpolací ze zadaných bodů.

V celé kapitole značí M bez indexu hmotnost celé, elektricky neutrální, částice s permanentním elektrickým dipólem, $E = |\vec{E}|$ velikost vektoru elektrické intenzity, W energii⁵, $\vec{R} = (X, Y, Z)^T$ polohový vektor částice ve zvolených souřadnicích a $r = \sqrt{X^2 + Y^2}$ radiální souřadnici ve válcové (cylindrické) soustavě souřadnic – v druhé jmenované je tedy

$$\vec{R} = (r, \varphi, z)^T \quad (2.1)$$

a v kartézských souřadnicích je Laplaceův operátor jednoduše

$$\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial X}, \frac{\partial}{\partial Y}, \frac{\partial}{\partial Z} \right)^T. \quad (2.2)$$

2.1 Dynamika permanentního elektrického dipólu v adiabatické aproximaci

Permanentní elektrický dipól částice se standardně značí jako $\vec{\mu}_e$; jednotkou v soustavě SI je $\text{C} \cdot \text{m}$. Nechť je dán model dvou bodových nábojů o stejné velikosti, ale opačného znaménka (q a $-q$) ve vzájemné vzdálenosti d – pak je elektrický dipól této dvojice vektor podél jejich spojnice, definitoricky od kladného náboje k zápornému, a jeho velikost je součinem náboje q a vzájemné vzdálenosti d . Tedy

$$\vec{\mu}_e = q\vec{d} = qd\vec{e}_d, \quad (2.3)$$

kde $\vec{e}_d$ je jednotkový bezrozměrný vektor ve směru spojnice nábojů od kladného k zápornému a $\vec{d}$ je stejně orientovaný vzájemný polohový vektor obou nábojů. Pro nebodové náboje není třeba tento model zcela opouštět, pokud se například elektronovému orbitalu atomu vodíku přisoudí střed jeho rozdělení a nahradí se nábojem $-e$ situovaným do tohoto bodu⁶.

⁴ať už skaláru nebo složek vektoru

⁵pro odlišení od elektrické intenzity

⁶logicky vede tento postup k nenulovému dipólu jen pro ty stavy atomu, jejichž nábojové rozdělení není symetrické vůči jádru – jen ty atomy mohou mít nenulový permanentní dipól

Potenciální energie náboje q v elektrickém poli je dána jako

$$W_p = q\Phi, \quad (2.4)$$

kde Φ je skalární potenciál elektrického pole. Tím se myslí potenciál od pole generovaného zvnějšku a příspěvky nábojů soustavy k celkovému potenciálu zanedbáváme⁷. Rovněž není uvažován vliv vnějšího pole nebo třetích nábojů na samotnou velikost dipólu – nechť jak μ_e , tak d jsou co do velikosti neměnné⁸. Protože je Φ pole, $\Phi = \Phi(\vec{R})$, je potřeba chápat potenciální energii $W_p(\vec{R}) = q\Phi(\vec{R})$ jako energii vyčíslovanou v bodě, kde se částice nachází, úměrně skalárnímu potenciálu tamtéž. Síla na náboj je pak dána jako

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}W_p = -q\vec{\nabla}\Phi = q\vec{E}, \quad (2.5)$$

což je samozřejmě nemagnetická složka Lorentzovy síly.

Potenciální energie soustavy dvou nábojů o pevné vzájemné vzdálenosti umístěné do vnějšího pole je zřejmě součtem potenciálních energií obou nábojů:

$$\begin{aligned} W_p &= W_+ + W_- = W(\vec{R}_+) + W(\vec{R}_-) = (+q)\Phi(\vec{R}_+) + (-q)\Phi(\vec{R}_-) = \\ &= q \left(\Phi(\vec{R}_+) + \Phi(\vec{R}_-) \right) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Je-li vhodné pracovat s dipólovou částicí jako s bodovou (o polohovém vektoru $\vec{R}$, který ji kinematicky úplně popisuje), brání zdánlivě tomuto dva různé polohové vektory $\vec{R}_+$ a $\vec{R}_-$ v předchozím výrazu. Pokud by se aproximovalo $\vec{R}_+ \cong \vec{R}_-$, potenciální energie by byla nulová; místo toho se standardně přistupuje k rozvinutí výrazů do prvního stupně. Oba náboje – kladný i záporný – lze asociovat s díly dipólové částice, například u atomu vodíku s jádrem a elektronem, které mají hmotnosti m_+ a m_- , přičemž hmotnost celé částice je $M \equiv m_+ + m_-$ a redukovaná hmotnost $\mu \equiv \frac{m_+m_-}{m_+ + m_-}$. Vedle už zavedené vzájemné polohy nábojů $\vec{d} \equiv \vec{R}_- - \vec{R}_+$ je poloha těžiště dána jako

$$\vec{R} \equiv \frac{m_+\vec{r}_+ + m_-\vec{r}_-}{m_+ + m_-}, \quad (2.7)$$

které dohromady tvoří soustavu rovnic pro polohy jednotlivých jader, které vychází jako

$$\vec{R}_- = \vec{R} + \frac{\mu}{m_-}\vec{d}, \quad (2.8a)$$

⁷tzv. pasivní úloha – zkoumaní účastníci neovlivňují vtištěné podmínky, ve kterých se vyvíjejí

⁸vyjma případu, kdy dojde k přeskokům mezi kvantovými stavy částice

$$\vec{R}_+ = \vec{R} - \frac{\mu}{m_+} \vec{d}. \quad (2.8b)$$

Pokud se takto vyjádřené polohové vektory dosadí do výrazu pro celkovou potenciální energii a ten rozvine do prvního řádu⁹, vychází

$$\begin{aligned} W_p &= q \left(\Phi \left(\vec{R} - \frac{\mu}{m_+} \vec{d} \right) - \Phi \left(\vec{R} + \frac{\mu}{m_-} \vec{d} \right) \right) \cong \\ &\cong q \left(\left(\Phi(\vec{R}) + \left(-\frac{\mu}{m_+} \vec{d} \right) \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{R}) \right) - \left(\Phi(\vec{R}) + \left(+\frac{\mu}{m_-} \vec{d} \right) \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{R}) \right) \right) = \\ &= q \left(-\frac{\mu}{m_+} \vec{d} \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{R}) - \frac{\mu}{m_-} \vec{d} \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{R}) \right) = -q \left(\frac{\mu}{m_+} + \frac{\mu}{m_-} \right) \vec{d} \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{R}) = \\ &= -q \vec{d} \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{R}) = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{R}) = \vec{\mu}_e \cdot \vec{E}(\vec{R}), \end{aligned} \quad (2.9)$$

tedy potenciální energie závisí na elektrické intenzitě v místě výskytu částice a na jejím elektrickém dipólu skrze skalární součin, aniž by bylo nutné se odkazovat na dílčí náboje $\pm q$ a jejich polohy nebo s nimi asociované hmotnosti. Pokud by se z takového výrazu pro potenciální energii odvozovala dynamika objektu, musel by se vzít v potaz úhel mezi oběma vektory – vedle rovnice pro sílu by bylo nutno uvážit i rovnici pro moment síly, který rozhoduje o tom, s jakou setrvačností („(ne)ochotou“) se dipól při pohybu částice prostorem natačí do směru lokálního pole. Pro pole, která nevykazují příliš velké prostorové nebo časové změny lze ale vyjít z aproximace¹⁰, že orientace dipólu do směru pole je okamžitá a úhel mezi dipólem a lokálním směrem vektoru elektrické intenzity neměnný [1, 18]. V tom případě lze místo $\vec{\mu}_e$ psát jeho průměr do směru vektoru $\vec{E}(\vec{R})$, tedy $\vec{\mu}_{e(E)} = \mu_{e(E)} \frac{\vec{E}}{|\vec{E}|}$ a potenciální energie

$$W_p = \vec{\mu}_{e(E)} \cdot \vec{E} = \mu_{e(E)} \frac{\vec{E}}{|\vec{E}|} \cdot \vec{E} = \mu_{e(E)} \frac{E^2}{E} = \mu_{e(E)} E(\vec{R}) \quad (2.10)$$

tedy závisí jen na velikosti elektrické intenzity v místě výskytu částice. Průmět $\vec{\mu}_{e(E)}$ do daného směru (zde vektoru elektrické intenzity) je kvantovaný, v případě atomu vodíku v elektrickém poli je vypočítán v rámci tzv. Starkova štěpení (jevu)¹¹:

⁹jedná se vlastně o Taylorovy rozvoje funkce vektorové proměnné okolo bodu $\vec{R}$

¹⁰někdy nazývané kvazistatická, jindy adiabatická

¹¹v magnetickém poli se pak permanentní magnetický dipól promítá kvantovaně do směru lokálního magnetického pole (tzv. Zeemanovo štěpení) – elektron v atomu vodíku s orbitálním kvantovým číslem l má velikost svého orbitálního magnetického dipólu roven $\hbar \sqrt{l(l+1)}$, maximální projekce je $\pm \hbar l$ a možné projekce jsou $\hbar m$, $m = -l, \dots, +l$

$$\mu_e(E) = \frac{3}{2}ea_0np, \quad (2.11)$$

kde $a_0 = \frac{\Lambda_C}{\alpha}$ je tzv. Bohrovův poloměr, n je hlavní kvantové číslo stavu atomu vodíku a p je tzv. parabolické kvantové číslo [19, 20]; parabolické kvantové číslo pro dané n probíhá množinu $-(n-1), \dots, n-1$, tedy stejnou jako magnetické kvantové číslo pro atom v magnetickém poli, ale nejsou spolu souměřitelná – atom ve stavu o daném p může mít libovolnou povolenou hodnotu m ¹². Není bez zajímavosti, že výraz pro štěpení spektra v elektrickém poli na rozdíl od sesterského výrazu pro magnetické pole neobsahuje Planckovu konstantu, což vede k domněnce, že by výraz měl jít odvodit i nekvantovými metodami – to potvrdil například Born pomocí (Laplace-)Runge-Lenzova vektoru [19]. Další rozbor k adiabatické aproximaci je pak v 5. kapitole.

Podobně lze samozřejmě upravit i kinetická energie a vychází

$$\begin{aligned} W_k &= W_{k(+)} + W_{k(-)} = \frac{1}{2}m_+\vec{v}_+^2 + \frac{1}{2}m_-\vec{v}_-^2 = \frac{1}{2}m_+\dot{\vec{R}}_+^2 + \frac{1}{2}m_-\dot{\vec{R}}_-^2 = \\ &= \frac{1}{2}m_+ \left(\dot{\vec{R}} - \frac{\mu}{m_+}\dot{\vec{d}} \right)^2 + \frac{1}{2}m_- \left(\dot{\vec{R}} + \frac{\mu}{m_-}\dot{\vec{d}} \right)^2 = \\ &= \frac{1}{2}m_+ \left(\dot{\vec{R}} \right)^2 + \frac{1}{2}m_- \left(\dot{\vec{R}} \right)^2 = \frac{1}{2}M\dot{\vec{R}}^2, \end{aligned} \quad (2.12)$$

protože podle předpokladu si zachovává $\vec{d}$ velikost a změna orientace jen kopíruje vnější elektrické pole. Celková energie částice s elektrickým dipólem ve vnějším elektrickém poli v přiblíženích popsaných v předchozích odstavcích tedy konečně je

$$W = W_k + W_p = \frac{1}{2}M\dot{\vec{R}}^2 + \mu_{e(E)}E(\vec{R}), \quad (2.13)$$

je tedy kinematicky plně¹³ popsána svým polohovým vektorem $\vec{R}$ a lze s ní nakládat jako s bodovou částicí.

2.2 Řešení Poissonovy rovnice pro vakuovou oblast mezi cylindrickými elektrodami

Nechť je dáno statické elektrické pole, které vzniká ve vakuu mezi dvěma koncentrickými válcovými elektrodami – na vnější elektrodě nechť je potenciál Φ_{in} a má poloměr r_{in} ,

¹²s tím se lze setkat například u zkřížených polí; nesouměřitelnost je dána tím, že elektrické a magnetické poruchy spolu nekomutují, pokud není jedno z dvojice polí nulové nebo pokud nejsou rovnoběžná [1, 19], což řadí úlohu o atomu vodíku v křížných polích mezi stále nevyřešené problémy fyziky

¹³při daném a neměnném kvantovém stavu

vnější pak bude na potenciálu Φ_{out} a s poloměrem r_{out} . Průběh potenciálu mezi elektrodami je dán Laplaceovou rovnicí

$$0 = \Delta\Phi = \frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial z^2}, \quad (2.14)$$

kteřá po převodu do válcových souřadnic (r, φ, z) nabývá podoby

$$0 = \frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial\Phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2\Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial z^2}. \quad (2.15)$$

Při válcové symetrii je $\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi} = 0$ a pokud je průběh neměnný i podél osy z , tak také $\frac{\partial\Phi}{\partial z} = 0$, odkud

$$0 = \frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial\Phi}{\partial r}, \quad (2.16)$$

což je rovnice už jen jedné proměnné, tedy lze upustit od parciálních derivací:

$$0 = \frac{d^2\Phi}{dr^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{d\Phi}{dr}. \quad (2.17)$$

Po substituci $f(r) \equiv \frac{d\Phi}{dr}$ je rovnice separovatelná na

$$\frac{df}{f} = -\frac{dr}{r}, \quad (2.18)$$

jejímž obecným řešením je

$$\ln f = \tilde{C}_2 - \ln r = \tilde{C}_2 + \ln \frac{1}{r} \Rightarrow f = C_2 \cdot \frac{1}{r}, \quad (2.19)$$

kde C_2 je integrační konstanta. Návratem k substituci pak dostáváme

$$\Phi = \int f(r)dr = \int \left(C_2 \cdot \frac{1}{r} \right) dr = C_1 + C_2 \cdot \ln r. \quad (2.20)$$

Konečně aplikací okrajových podmínek $\Phi(r_{\text{in}}) = \Phi_{\text{in}}$ a $\Phi(r_{\text{out}}) = \Phi_{\text{out}}$ dostáváme

$$C_1 = \frac{\Phi_{\text{in}} \cdot \ln r_{\text{out}} - \Phi_{\text{out}} \cdot \ln r_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \quad (2.21a)$$

$$C_2 = \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \quad (2.21b)$$

$$\Phi = \frac{\Phi_{\text{in}} \cdot \ln r_{\text{out}} - \Phi_{\text{out}} \cdot \ln r_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} + \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \cdot \ln r =$$

$$= \frac{\ln \frac{r}{r_{\text{in}}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} (\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}) + \Phi_{\text{in}}, \quad (2.21c)$$

kde poslední úprava zařídila, aby byl argument logaritmu bezrozměrný, tedy dobře definovaný. Pohyb částice je samozřejmě limitován pouze na oblast mezi elektrodami, tj.

$$r \in (r_{\text{in}}, r_{\text{out}}). \quad (2.22)$$

Pokud se v tomto poli bude pohybovat částice s permanentním elektrickým dipólem za podmínek vymezených výše, bude její potenciální energie, jak bylo odvozeno, $W_p = \mu_{e(E)} E(\vec{R})$. Protože vztah mezi potenciálem elektrického pole a jeho intenzitou je $\vec{E}(\vec{R}) = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{R})$, je v případě válcově symetrických elektrod

$$\vec{E}(\vec{R}) = - \left(\frac{\partial}{\partial X}, \frac{\partial}{\partial Y}, \frac{\partial}{\partial Z} \right)^T \Phi(\vec{R}), \quad (2.23)$$

kde ovšem $\vec{R} = (X, Y, Z)^T$ a $\Phi(\vec{R}) = \left(\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}} \right)^{-1} \cdot \left(\Phi_{\text{out}} \cdot \ln \frac{r}{r_{\text{in}}} - \Phi_{\text{in}} \cdot \ln \frac{r}{r_{\text{out}}} \right)$, takže

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{R}) &= - \left(\frac{\partial}{\partial X}, \frac{\partial}{\partial Y}, \frac{\partial}{\partial Z} \right)^T \left(\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}} \right)^{-1} \cdot \left(\Phi_{\text{out}} \cdot \ln \frac{r}{r_{\text{in}}} - \Phi_{\text{in}} \cdot \ln \frac{r}{r_{\text{out}}} \right) = \\ &= - \left(\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}} \right)^{-1} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial X}, \frac{\partial}{\partial Y}, \frac{\partial}{\partial Z} \right)^T \left(\Phi_{\text{out}} \cdot \ln \frac{\sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}}{r_{\text{in}}} - \Phi_{\text{in}} \cdot \ln \frac{r}{r_{\text{out}}} \right) = \\ &= - \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \cdot \frac{1}{r} \cdot \left(\frac{X}{\sqrt{X^2 + Y^2}}, \frac{Y}{\sqrt{X^2 + Y^2}}, 0 \right)^T = \\ &= - \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \cdot \left(\frac{X}{r^2}, \frac{Y}{r^2}, 0 \right)^T, \end{aligned} \quad (2.24)$$

odkud

$$E(\vec{R}) = |\vec{E}(\vec{R})| = \left| \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \right| \cdot \sqrt{\frac{X^2}{r^4} + \frac{Y^2}{r^4}} = \left| \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \right| \cdot \frac{1}{r}. \quad (2.25)$$

Ještě lépe (rychleji a s explicitní znalostí znaménka) dopadne výpočet po úvaze, že vzhledem k radiální symetrii potenciálu bude existovat rovněž jediný – radiální – směr, ve kterém se vektory $\vec{E}$ zorientují, tedy

$$E_r = -\frac{\partial \Phi}{\partial r} = -\frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \cdot \frac{1}{r}, \quad (2.26)$$

kde E_r je radiální složka vektoru elektrické intenzity. Potenciální energie elektrického dipólu mezi válcovými elektrodami tedy bude

$$W_p = \mu_{e(E)} \left| \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \right| \cdot \frac{1}{r} = \frac{\kappa}{r}, \quad (2.27)$$

kde bylo označeno $\kappa \equiv \mu_{e(E)} \left| \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \right|$. Například pro atom vodíku je $\kappa = \frac{3}{2} e a_0 n p \cdot \left| \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \right|$, přičemž znaménko je dáno číslem $p = -(n-1), \dots, n-1$, takže pro některé atomy je výraz kladný, pro některé nulový a pro některé záporný – a je-li záporný, pak formálně odpovídá přitažlivému potenciálu typu $\frac{1}{r}$, tedy Keplerově úloze. Síla působící na částici v tomto uspořádání pak bude mít rovněž jen radiální složku $F_r(r) = -\frac{\kappa}{r^2}$ a ta je úměrná $\frac{\partial E_r(r)}{\partial r}$ – při srovnání s coulombickou interakcí $F_r(r) = qE_r(r)$ je zřejmé, že náhrada náboje za první nábojový moment je ”kompenzována” náhradou elektrické intenzity za její první derivaci.

2.3 Keplerovský pohyb částice s elektrickým dipólem mezi cylindrickými elektrodami

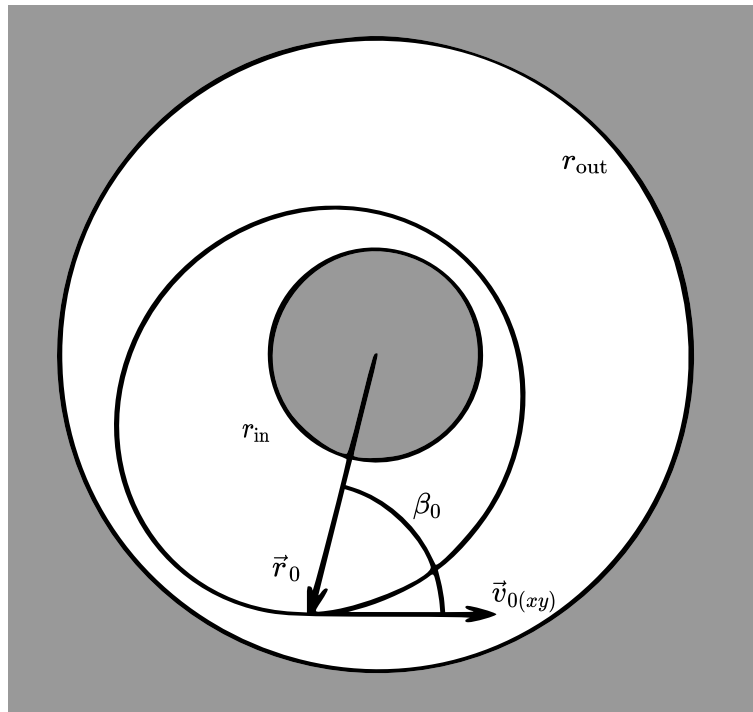
Potenciální energie přitažlivého keplerovského potenciálu částice s elektrickým dipólem mezi válcovými elektrodami je $-\frac{\tilde{\kappa}}{r}$. V první řadě je třeba si uvědomit, že se striktně vzato o keplerovský potenciál nejedná, protože vzhledem k centru symetrie potenciálu závisí pravý keplerovský potenciál jako $\frac{1}{R}$, kde ale R značí sférickou (opravdu radiální) proměnnou, zatímco v probíraném uspořádání elektrod se vychází ponteciál závislý na převrácené hodnotě cylindrické souřadnice r . Ekvivalentně – v pravém keplerovském potenciálu je význačný vzhledem k symetrii potenciálu jen jediný bod (centrum), ale u válcových elektrod je to přímka¹⁴. V pravém keplerovském potenciálu leží vektory $\vec{v}_0$, $\vec{R}_0$ a $\vec{F}$ v jedné rovině (což jde ruku v ruce se zachováním momentu hybnosti vůči silovému centru).

V potenciálu ve válcových elektrodách ale obecně takové uspořádání nenastává, protože vektory $\vec{F}$ a $\vec{v}_0$ sice definují rovinu, ale ta je jednak v libovolné orientaci vůči ose z jakožto symetrii potenciálu a jednak se obecně v této rovině ani pohyb neudrží¹⁵. Speciálním případem ovšem je, pokud vektor počáteční rychlosti $\vec{v}_0$ bude v rovině kolmé na osu z – pak se v této rovině nachází i vektor silového působení $\vec{F}$ a pohyb částice v této rovině zřejmě zůstane vázán; průsečík této roviny s osou z se pak chová jako zdrojové

¹⁴i když leží v pro částice zakázané oblasti podle (2.22)

¹⁵vektor $\vec{F}$ míří vždy ve směru nejkratší vzdálenosti k ose z

centrum keplerovského potenciálu. Pohyb pak stačí vyšetřovat v polárních souřadnicích zavedených v této rovině.



Obr. 2.1: Význam veličin r_0 , $v_{0(xy)}$ a β_0 , tj. kinematických veličin na počátku pohybu částice, v rovině $x-y$ a v soustavě, kde se nekoná pohyb podél osy z (kolmo k rovině obrázku) – r_0 je cylindrická radiální souřadnice na počátku pohybu, $v_{0(xy)} = |\vec{v}_{0(xy)}|$ počáteční rychlost v této rovině a β_0 představuje úhel sevřený průvodičem $\vec{r}_0$ a vektorem $\vec{v}_{0(xy)}$, který je tedy nulový pro pohyb k ose z a roven π pro pohyb od ní. Šedivé plochy jsou vnitřky elektrod, kde se částice pohybovat nemůže. Nakreslená elipsa znázorňuje příklad pohybu po uzavřené křivce, která se vejde do povolené oblasti mezi elektrodami, daného, mimo jiné, právě vhodnou volbou počátečních podmínek. Vektor $\vec{v}_{0(xy)}$ míří z bodu $\vec{r}_0$ samozřejmě ve směru tečny ke křivce pohybu. V obrázku jsou vyznačeny i poloměry vnitřní a vnější elektrody r_{in} a r_{out} .

Tento rozbor speciálního případu ale také napovídá, jak si poradit s obecnou orientací $\vec{v}_0$ – každý vektor počáteční rychlosti lze jednoznačně rozložit na směr kolmý k ose z a na směr rovnoběžný s ní:

$$\vec{v}_0 = \vec{v}_{0(xy)} + \vec{v}_{0(z)} \quad (2.28)$$

Protože je síla $\vec{F}$ vždy kolmá na směr $v_{0(z)}$, je pohyb v tomto směru bezsilový, tudíž rovnoměrný a přímočarý; v rovině kolmé na osu z a rovnoběžné s vektorem $\vec{v}_0$ se pak děje keplerovský pohyb, ovšem s tím, že tato rovina se rovnoměrně a přímočaře posouvá podél osy z rychlostí $\vec{v}_{0(z)}$. Úvaha o vzájemné poloze $\vec{v}_0$ a $\vec{F}$ by mohla vést k mylnému závěru, že se podél osy z koná harmonický pohyb nebo že při libovolné orientaci $\vec{v}_0$ je pohybem vždy elipsa v nehybné rovině, ale rozdělení vektoru $\vec{v}_0$ na $\vec{v}_{0(xy)}$ a $\vec{v}_{0(z)}$ jasně dokládá, že pohyb bude eliptický v rovině, která se pro $\vec{v}_{0(z)} \neq 0$ posouvá podél osy z , a to právě rychlostí $v_{0(z)}$. Stručně: v soustavě, kde je $v_{0(z)} = 0$, budou vektory $\vec{v}_{0(xy)}$, $\vec{R}_0$ a $\vec{F}$ v jedné rovině a pohyb bude keplerovský.

Keplerovský pohyb je tedy formálně nejsnazší vyšetřit v soustavě, kde $v_{0(z)} = 0$. V této rovině jsou už zavedeny souřadnice r a φ ; budiž ještě definováno β_0 jako úhel mezi průvodičem a vektorem $v_{0(xy)}$ ($\beta_0 = 0$ pro pohyb směrem k centru a $\beta_0 = \pi$ pro pohyb od centra); β je pak stejně definovaný úhel pro vektor rychlosti $\vec{v}_{xy}$ v této rovině v libovolném čase. Veličiny jsou znázorněny v Obr. 2.1. Moment hybnosti se zachovává co do velikosti i směru (je na rovinu kolmý), takže ho stačí vyjádřit jako skalár:

$$L = \left| \vec{L} \right| = |\vec{p} \times \vec{r}| = Mr^2\dot{\varphi} = Mv_{xy}r \sin \beta, \quad (2.29)$$

Protože moment hybnosti vyčíslen v počátku pozorování je roven $Mv_{0(xy)}r_0 \sin \beta_0$, kde r_0 je poloměr, na kterém se nachází částice v okamžiku počátku pozorování¹⁶, lze psát

$$Mr^2\dot{\varphi} = Mv_{0(xy)}r_0 \sin \beta_0 \equiv L_0. \quad (2.30)$$

L_0 přirozeně značí počáteční hodnotu momentu hybnosti. Podobně pro celkovou energii lze psát

$$W = \frac{1}{2}M\dot{r}^2 - \frac{\tilde{\kappa}}{r} = \frac{1}{2}M\dot{r}^2 + \frac{1}{2}Mr^2\dot{\varphi}^2 - \frac{\tilde{\kappa}}{r} = \frac{1}{2}M\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2Mr^2} - \frac{\tilde{\kappa}}{r} \quad (2.31a)$$

$$W_0 = \frac{1}{2}Mv_{0(xy)}^2 - \frac{\tilde{\kappa}}{r_0} = \frac{1}{2}Mv_{0(xy)}^2 \cos^2 \beta_0 + \frac{L^2}{2Mr^2} - \frac{\tilde{\kappa}}{r} \quad (2.31b)$$

Z obou rovnic se snadno vyjádří časové derivace:

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi}{dt} &= \frac{v_{0(xy)}r_0 \sin \beta_0}{r^2} = \frac{L_0}{Mr^2} \\ \frac{dr}{dt} &= \pm \sqrt{v_{0(xy)}^2 - \frac{2\tilde{\kappa}}{Mr_0} + \frac{2\tilde{\kappa}}{Mr} - \frac{L^2}{M^2r^2}} = \end{aligned} \quad (2.32a)$$

¹⁶v něm má částice rychlost $v_{0(xy)}$ a směr pohybu β_0 vůči průvodiči

$$= \sqrt{\frac{2W_0}{M} + \left(\frac{\tilde{\kappa}}{L_0}\right)^2 - \left(\frac{L_0}{Mr} - \frac{\tilde{\kappa}}{L_0}\right)^2} \quad (2.32b)$$

V druhé rovnici pod odmocninou bylo vhodně doplněno na úplný čtverec. Podělením obou rovnic se ze soustavy vyloučí čas a vyjde rovnice trajektorie:

$$\frac{d\varphi}{dr} = \frac{\frac{L_0}{Mr^2}}{\sqrt{\frac{2W_0}{M} + \left(\frac{\tilde{\kappa}}{L_0}\right)^2 - \left(\frac{L_0}{Mr} - \frac{\tilde{\kappa}}{L_0}\right)^2}} \quad (2.33)$$

Přímočaře pak

$$\begin{aligned} \varphi &= \int d\varphi = \int \frac{d\varphi}{dr} dr = \int \frac{\frac{L_0}{Mr^2}}{\sqrt{\frac{2W_0}{M} + \left(\frac{\tilde{\kappa}}{L_0}\right)^2 - \left(\frac{L_0}{Mr} - \frac{\tilde{\kappa}}{L_0}\right)^2}} dr = \\ &= \int -\frac{-\frac{L_0}{Mr^2}}{\sqrt{\frac{2W_0}{M} + \left(\frac{\tilde{\kappa}}{L_0}\right)^2 - \left(\frac{L_0}{Mr} - \frac{\tilde{\kappa}}{L_0}\right)^2}} dr = \left[\begin{array}{l} y_0^2 \equiv \frac{2W_0}{M} + \left(\frac{\tilde{\kappa}}{L_0}\right)^2 \\ y \equiv \frac{L_0}{Mr} - \frac{\tilde{\kappa}}{L_0} \Rightarrow dy = -\frac{L_0}{Mr^2} \end{array} \right] = \\ &= \int -\frac{dy}{\sqrt{y_0^2 - y^2}} = \int -\frac{\frac{dy}{y_0}}{\sqrt{1 - \left(\frac{y}{y_0}\right)^2}} = \arccos \frac{y}{y_0} + C, \end{aligned} \quad (2.34)$$

kde C je integrační konstanta, kterou lze volit nulovou¹⁷. Je tedy

$$y = y_0 \cos \varphi, \quad (2.35)$$

neboli návratem k substitucím

$$\frac{L_0}{Mr} - \frac{\tilde{\kappa}}{L_0} = \sqrt{\frac{2W_0}{M} + \left(\frac{\tilde{\kappa}}{L_0}\right)^2} \cdot \cos \varphi. \quad (2.36)$$

Vynásobí-li se ještě rovnice převrácenou hodnotou členu $\frac{\tilde{\kappa}}{L_0}$, který jako jediný nezávisí na proměnných φ a r , vychází

$$\frac{\frac{L_0^2}{M\tilde{\kappa}}}{r} = 1 + \sqrt{1 + \frac{2W_0 L_0^2}{M\tilde{\kappa}^2}} \cdot \cos \varphi. \quad (2.37)$$

¹⁷souvisí s volbou počátku souřadnice φ ("nultý poledník") a při volbě $C = 0$ odpovídá $\varphi = 0$ největšímu přiblížení částice ke středu symetrie vnějšího pole [21]

2.4 Parametrizace keplerovského pohybu a kritéria zachycení částice s elektrickým dipólem

V proměnných r a φ je toto rovnice kuželosečky pro počátek umístěný v ohnisku, kde je odmocnina rovna (bezrozměrné) excentricitě kuželosečky a čítenel velkého zlomku na levé straně tzv. parametru kuželosečky. Úkolem je najít, kdy nastává (v principu časově neomezený) záchyt částic, tedy ve válcové konfiguraci elektrod trajektorie, které jsou eliptické nebo kruhové – těm odpovídá excentricita menší než jedna (nulová je pro kružnici). Ukazuje se, že pro případ dipólové částice zachycené ve válcově symetrických elektrodách, kde je spousta vstupních parametrů (kvantová čísla n a p , parametry elektrod r_{in} , r_{out} a Φ_{out} , Φ_{in} , počáteční podmínky r_0 , $v_{0(xy)}$ a β_0 , resp. $\sin \beta_0$, technicky i M), existuje způsob, jak problém parametrizovat efektivněji. Nechť jsou zavedeny tyto bezrozměrné parametry:

$$\rho \equiv \frac{r_{\text{in}}}{r_0} < 1 \quad (2.38a)$$

$$R \equiv \frac{r_{\text{out}}}{r_0} > 1 \quad (2.38b)$$

$$\eta_0 \equiv \frac{|W_{p0}|}{W_{k0}} > 0 \quad (2.38c)$$

Počáteční kinetická energie W_{k0} je vždy nezáporná. Formálně lze dodefinovat $v_{0(xy)} = 0 \Rightarrow W_{k0} = 0 \Rightarrow \eta_0 = +\infty$, ale tento případ stejně nikdy zachycením skončit nemůže (dojde k nárazu na vnitřní elektrodu, libovolně malou). Pro uzavřené orbity se automaticky předpokládají i celkové záporné energie částic, aby byly ve vázaném stavu s pastí, připouští se tedy jen záporné (počáteční) potenciální energie $W_{p0} < 0$ a dále se na znaménko u potenciální energie nepřihlíží – při tomto značení je celková energie zachycené částice

$$W = W_k + W_p = W_k - |W_p| \quad (2.39)$$

a celková počáteční energie

$$W_0 = W_{k0} + W_{p0} = W_{k0} - |W_{p0}|. \quad (2.40)$$

Pro moment hybnosti $L = L_0$ vychází

$$L_0 = M v_{0(xy)} r_0 \sin \beta_0 \Rightarrow L_0^2 = M^2 v_{0(xy)}^2 r_0^2 \sin^2 \beta_0 = 2M \tilde{\kappa}^2 \frac{W_{k0}}{|W_{p0}|^2} \sin^2 \beta_0, \quad (2.41)$$

odkud je parametr elipsy/kružnice

$$p = \frac{L_0^2}{M\tilde{\kappa}} = \frac{2r_0}{\eta_0} \sin^2 \beta_0 \quad (2.42)$$

a excentricita

$$e = \sqrt{1 + \frac{2W_0 L_0^2}{M\tilde{\kappa}^2}} = \sqrt{1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0}, \quad (2.43)$$

tedy rovnice elipsy/kružnice nabývá podoby

$$\frac{\frac{2r_0}{\eta_0} \sin^2 \beta_0}{r} = 1 + \sqrt{1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0} \cdot \cos \varphi. \quad (2.44)$$

Z rovnice se dá vyjádřit poloměr jako

$$r = \frac{\frac{2r_0}{\eta_0} \sin^2 \beta_0}{1 + \sqrt{1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0} \cdot \cos \varphi}. \quad (2.45)$$

Uzavřená trajektorie elipsy a kružnice musí mít $r \in (r_{\text{in}}, r_{\text{out}})$, ekvivalentně se do tohoto intervalu musí vejít body největšího přiblížení a vzdálení od osy válcové symetrie¹⁸. Snadno plyne, že těmto bodům odpovídá $\cos \varphi = \pm 1$, je tedy

$$r_{\text{min}} = \frac{\frac{2r_0}{\eta_0} \sin^2 \beta_0}{1 + \sqrt{1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0}}, \quad (2.46a)$$

$$r_{\text{max}} = \frac{\frac{2r_0}{\eta_0} \sin^2 \beta_0}{1 - \sqrt{1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0}}. \quad (2.46b)$$

Podmínka $r \in (r_{\text{in}}, r_{\text{out}})$ se pak ekvivalentně vyjádří jako

$$r_{\text{in}} < r_{\text{min}} = \frac{\frac{2r_0}{\eta_0} \sin^2 \beta_0}{1 + \sqrt{1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0}} \quad (2.47a)$$

$$r_{\text{out}} > r_{\text{max}} = \frac{\frac{2r_0}{\eta_0} \sin^2 \beta_0}{1 - \sqrt{1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0}}, \quad (2.47b)$$

neboli s pomocí parametrů ρ a R

¹⁸”perihelium” a ”afelium”

$$\rho < \frac{\frac{2}{\eta_0} \sin^2 \beta_0}{1 + \sqrt{1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0}}, \quad (2.48a)$$

$$R > \frac{\frac{2}{\eta_0} \sin^2 \beta_0}{1 - \sqrt{1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0}}. \quad (2.48b)$$

Vyjádří-li se v první podmínce odmocnina, vychází po umocnění

$$1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0 < \frac{4}{\eta_0^2 \rho^2} \sin^4 \beta_0 - \frac{4}{\eta_0 \rho} \sin^2 \beta_0 + 1, \quad (2.49)$$

což se snadno upraví na

$$\rho^2 - \rho^2 \eta_0 < \sin^2 \beta_0 - \eta_0 \rho. \quad (2.50)$$

Tuto relaci je vhodné vyšetřit dvěma způsoby – jednak po vyjádření $\sin^2 \beta_0$ a jednak η_0 . První vyjádření dává

$$\sin^2 \beta_0 > \rho^2 - \rho^2 \eta_0 + \eta_0 \rho, \quad (2.51)$$

neboli nutnou podmínku na sinus úhlu počátečního pohybu. Zjevně je nutné, aby tento byl větší než nějaká minimální hodnota, tj. aby měl nějaké minimální odchýlení od průvodiče – to je logické, například pro $\sin \beta_0 = 0$, neboli $\beta_0 = 0, \pi$, pohyb určitě skončí nárazem na elektrody¹⁹ a stejně tak určitě i další blízké úhly, protože $r_{\text{in}} > 0$ a $r_{\text{out}} < +\infty$. Je ale možné, že pro určité parametry pasti a hlavně pro určité $\rho = \frac{r_{\text{in}}}{r_0}$ nemůže uzavřená orbita vůbec nastat – to pokud by musel být kvadrát sinu být větší než jednička. Tuto podmínku lze vystihnout jako

$$\rho^2 - \rho^2 \eta_0 + \eta_0 \rho \leq 1, \quad (2.52)$$

odkud

$$\eta_0 \rho (1 - \rho) \leq (1 + \rho) (1 - \rho), \quad (2.53)$$

což vzhledem k $\rho < 1$ lze zkrátit beze změny znaménka na

$$\eta_0 \leq 1 + \frac{1}{\rho}, \quad (2.54)$$

¹⁹tento případ kritérium zachycení nikdy nesplní a proto bylo přípustné v předchozí úpravě dělit kvadrátem sinu

a to je první omezení pro počáteční podmínky vzhledem k parametrům pasti.

Vyjádřením parametru η_0 z původní nerovnosti máme

$$\eta_0 < \frac{1}{\rho(1-\rho)} \sin^2 \beta_0 - \frac{\rho}{1-\rho}, \quad (2.55)$$

což je množina bodů v rovině $\sin^2 \beta_0$ – η_0 podmínce zachycení vyhovujících²⁰.

Zopakuje-li se sled úváj pro podmínku

$$R > \frac{\frac{2}{\eta_0} \sin^2 \beta_0}{1 - \sqrt{1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0}}, \quad (2.56)$$

vyjde

$$\eta_0 \geq 1 + \frac{1}{R} \quad (2.57)$$

a

$$\eta_0 > -\frac{1}{R(R-1)} \sin^2 \beta_0 + \frac{R}{(R-1)}, \quad (2.58)$$

kde při úpravách a interpretaci je potřeba zohlednit, že $R > 1 \Rightarrow 1 - R < 0$.

Úvahy je ještě vhodné doplnit pro kontrolu o podmínku uzavřené orbity ($0 \leq e < 1$), tedy

$$\sqrt{1 + 4 \left(\frac{1}{\eta_0^2} - \frac{1}{\eta_0} \right) \sin^2 \beta_0} < 1, \quad (2.59)$$

což pro $\sin^2 \beta_0 \neq 0$ přechází na

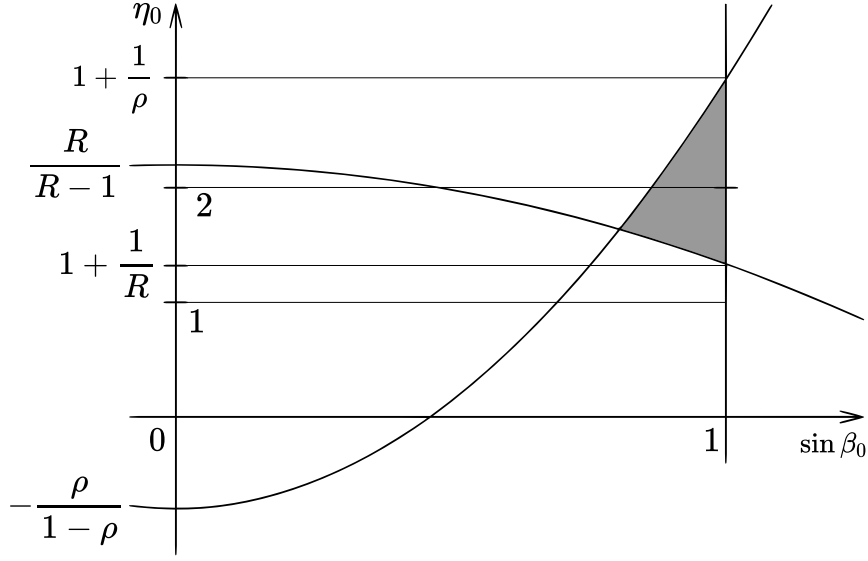
$$\eta_0 > 1, \quad (2.60)$$

což ale vzhledem k $\eta_0 \geq 1 + \frac{1}{R}$, $R > 1$ nepodává žádné nové omezení²¹.

Kritéria zachycení částice se dají vyjádřit i graficky do diagramu $\sin \beta_0$ – η_0 , jak se lze přesvědčit v Obr. 2.2.

²⁰ $\eta_0 = \frac{\sin^2 \beta_0}{\rho(1-\rho)} - \frac{1}{1-\rho}$ je potom hranice této oblasti

²¹rovnost v $\eta_0 \geq 1 + \frac{1}{R}$ nastává pro limitní případ $R \rightarrow +\infty$



Obr. 2.2: Grafické znázornění kritéria úspěšného zachycení částice pastí na uzavřené orbitě do oblasti mezi elektrodami – $\eta_0 \equiv \frac{|E_{p0}|}{E_{k0}}$ je poměr počáteční potenciální a kinematické energie částice v absolutní hodnotě, β_0 je počáteční směr pohybu (vymezený mimo jiné v Obr. 2.1) a $R \equiv \frac{r_{\text{out}}}{r_0}$ a $\rho \equiv \frac{r_{\text{in}}}{r_0}$ (také k nahlédnutí v Obr. 2.1). Plocha v šedé barvě představuje při daných R a ρ oblast takových dvojic $\sin \beta_0$ – η_0 , pro které se částice zachytí na elipsu nebo kružnici, která se vejde mezi elektrody – je dána trojicí nerovností: $\sin \beta_0 \leq 1$ (ohraničená svislou přímkou), $\eta_0 > -\frac{1}{R(R-1)} \sin^2 \beta_0 + \frac{R}{(R-1)}$ (ohraničená klesající parabolou) a $\eta_0 < \frac{1}{\rho(1-\rho)} \sin^2 \beta_0 - \frac{\rho}{1-\rho}$ (ohraničená rostoucí parabolou). Bod $(1, 2)^T$ (naznačený křížkem na pravé straně oblasti úspěšného zachycení) představuje kruhové orbity. Pro velmi úzkou oblast mezi elektrodami $r_{\text{in}} \rightarrow r_{\text{out}}$ konvergují vrcholy povolené oblasti právě k bodu $(1, 2)^T$ a pro kruhovou orbitu tedy vždy zbývá místo.

Nutné podmínky zachycení se dají shrnout takto:

$$\eta_0 \in \left\langle 1 + \frac{1}{R}, 1 + \frac{1}{\rho} \right\rangle \quad (2.61a)$$

$$\sin \beta_0 \geq \sqrt{\frac{R\rho}{R + \rho - 1}} \quad (2.61b)$$

Postačující podmínka je dána dvojicí nerovností pro η_0 a $\sin \beta_0 \leq 1$. Je vhodné poukázat, že i když pořadí bodů $1 + \frac{1}{\rho}$ a $\frac{R}{R-1}$ může být pro různé hodnoty ρ a R různé, kvalitativně zůstává povolená oblast v $\sin \beta_0$ – η_0 diagramu stejná.

Význačné postavení zaujímá mezi trajektoriemi ta kruhová – podmínkou kruhové orbity je v absolutní hodnotě rovnost odstředivé a dostředivé síly, tedy

$$\frac{Mv_{0(xy)}^2}{r_0} = \frac{Mv^2}{r} = \frac{\tilde{\kappa}}{r^2} = \frac{\tilde{\kappa}}{r_0^2}, \quad (2.62)$$

odkud $v_{0(xy)}^2 = \frac{\tilde{\kappa}}{Mr_0}$ a

$$\eta_0 = \frac{|E_{p0}|}{E_{k0}} = \frac{\frac{\tilde{\kappa}}{r_0}}{\frac{1}{2}Mv_{0(xy)}^2} = \frac{2\tilde{\kappa}}{Mv_{0(xy)}^2 r_0} = \frac{2\tilde{\kappa}}{M\frac{\tilde{\kappa}}{Mr_0}r_0} = 2; \quad (2.63)$$

navíc samozřejmě musí být vektor $\vec{v}_{xy}$ kdykoliv kolmý na průvodič, tedy $\sin \beta_0 = 1$. Je několik pozorování týkajících se kruhových orbit, která lze učinit před samotným rozбором problému zachycení částic a podle kterých lze zkontrolovat správnost analýzy:

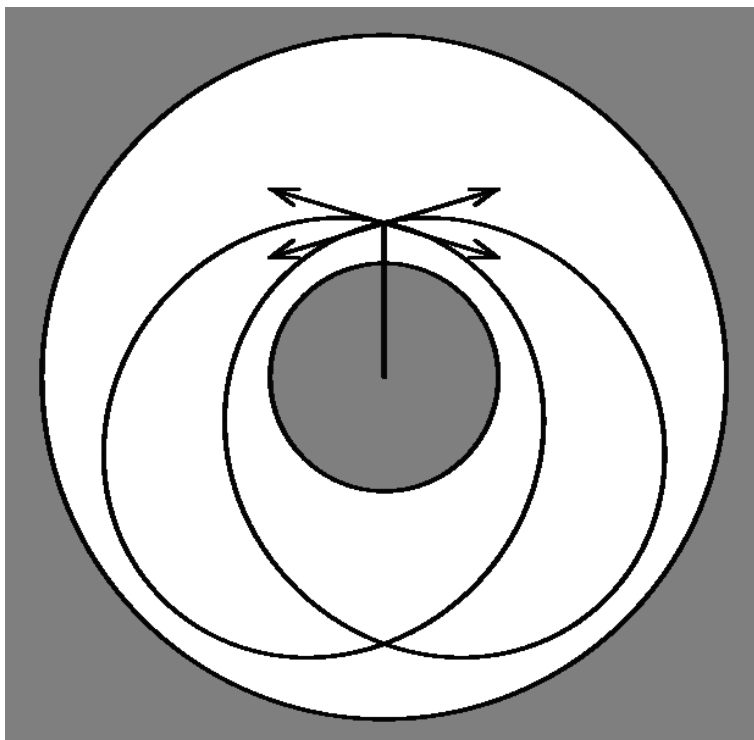
- Kdykoliv pro $r_{\text{in}} < r_{\text{out}}$ musí existovat prostor pro kruhovou orbitu s libovolným r_0 .
- Pro limitní případ $r_{\text{in}} \rightarrow r_{\text{out}}$ existuje právě jen kruhová orbita.
- Pro $r_0 \rightarrow r_{\text{in}}$ je zachycení možné také jen pro kruhovou orbitu.
- I pro $r_0 \rightarrow r_{\text{in}}$ je možná pouze kruhová orbita.
- Pro $r_{\text{in}} < r_0 < r_{\text{out}}$ existují vedle $\sin \beta_0 = 1$ i jiné (nekruhové) orbity s $\eta_0 = 2$.
- Pro $\sin \beta_0 = 1$ a $\eta_0 = 2$ by měla vyjít nulová excentricita.
- Pro $\sin \beta_0 = 1$ a $\eta_0 = 2$ by se měla rovnice trajektorie v polárních souřadnicích zjednodušit na triviální $r = r_0$ (souvisí s předchozím bodem).

Vedle jmenovaných podmínek pro kruhové orbity je ještě rovněž zřejmé, že:

- Existuje takové $\tilde{\beta}_0$, že $\forall \sin \beta_0 < \sin \tilde{\beta}_0$ nemůže k záhytu dojít (dojde k nárazu na elektrody).
- Stejně tak pro dané r_0 určitě existuje $\tilde{v}_{0(xy)}$ takové, že $\forall v_{0(xy)}^2 < \tilde{v}_{0(xy)}^2$ není zachycení částice možné, protože narazí na vnitřní elektrodu. Pro příliš velké rychlosti a vnější elektrodu lze očekávat podobné kritérium.
- Rozbor kritérií zachycení pracuje s parametrem $\sin \beta_0$, ale pokud je tento různý od jedničky, existují po dvojicích různé β_0 ²² se stejnou hodnotou $\sin \beta_0$, které

²²z intervalů $(0, \frac{\pi}{2})$ a $(\frac{\pi}{2}, \pi) - \sin(\pi - \beta_0) = \sin \beta_0$

v analýze zdánlivě nejsou podchyceny; rovněž intuitivně by se mohlo zdát, že podle orientaci počátečního směru pohybu budou některé částice zachyceny spíše než jiné. Snadná úvaha o symetrii vůči průvodiči ale ihned k $\vec{v}_{0(xy)}$ zkonstruuje další tři (obecně) různé vektory, které mají stejné $\sin \beta_0$ a jejich zachycení je ekvivalentní k původnímu, jak je znázorněno v 2.3.



Obr. 2.3: Symetrie pro úspěšné zachycení – pro stejné r_0 . $v_{0(xy)}$ a $\sin \beta_0$ existují obecně čtyři vektory $\vec{v}_{0(xy)}$, které jsou trojicí r_0 , $\vec{v}_{0(xy)}$ a $\sin \beta_0$ reprezentovány. Po dvou přísluší dvěma elipsám, které jsou symetrické podle průvodiče $\vec{r}_0$.

Všechna tato pozorování jsou rozbořem potvrzena.

2.5 Rozbor keplerovské pasti

Je vhodné upozornit, že i když je potenciál ve zkoumané rovině keplerovský, tedy úměrný $\frac{1}{r}$, rozdíly oproti prostému gravitačnímu keplerovskému potenciálu přeci jen existují. Jsou-li r_{in} a r_{out} pevná, pak je odlišnost pouze v tom, že povolená oblast poloměrů výskytu je omezená shora; v gravitačním keplerovském potenciálu, kde $r_{\text{out}} \rightarrow +\infty$ a

$\tilde{\kappa} \neq \tilde{\kappa}(r_{\text{in}}, r_{\text{out}})$, ovšem je možné v reálném čase měnit r_{in} (radiální pulzování s libovolným časovým průběhem), aniž by oblast nad ním byla co do potenciálu zasažena, a pro částici, jejíž pohyb zkoumáme, se mění jen velikost oblasti, kde má částice povolený rozsah pohybu. Toto pro válcové elektrody neplatí, protože $\tilde{\kappa} = \tilde{\kappa}(r_{\text{in}}, r_{\text{out}})$ a tedy radiálním posunem jedné z elektrod se změní i průběh potenciálu. V tomto smyslu je důležité pamatovat i na to, že parametry ρ , R a η_0 z kritérií zachycení nejsou navzájem nezávislé – je-li například dáno η_0 , jsou implicitně pevně dány i r_{in} a r_{out} a pak je volný už jen jeden z dvojice ρ a R .

Důležitou technickou otázkou je, jak částice do takové pasti vpravit – i za předpokladu, že mimo oblast $(r_{\text{in}}, r_{\text{out}})$ na částice žádná síla nepůsobí, tak při vstupu do oblasti pasti otvůrkem zanedbatelné velikosti v jedné z elektrod je pro libovolné $\sin \beta_0 \neq 0$ ²³ zřejmé, že na jiném místě částice do elektrody narazí znovu. Toto lze obejít, pokud v oblasti pastí budou dipólové částice přímo vznikat. Například pro vodík mohou být do pasti zavedeny elektrony a protony/deuterony²⁴, které permanentní elektrický dipól nemají, tedy místo výše uvedené pohybové rovnice se řídí prostou Lorentzovou silou, a pokud někde mezi elektrodami rekombinují za vzniku vodíku, který už permanentní dipól mít může, je v tomto místě kinematikou srážky určeno $v_{0(xy)}$, r_0 (tedy η_0) i $\sin \beta_0$ pro dipólovou částici – ta už se na uzavřené orbitě dostat může, protože její (doslovná) počáteční podmínka je mimo bezprostřední hranici oblasti. Pro clustery rydbergovské hmoty²⁵, které nevznikají evaporací z povrchů elektrod, ale v prostoru kondenzací atomů, lze předpokládat podobný závěr.

A konečně zbývá rozřešit zachycení v podélném směru, podél osy z , kde ve válcově symetrickém uspořádání elektrod žádná síla nepůsobí; je-li tedy $v_{0(z)} \neq 0$, částice může unikat do nekonečna podél osy válcové symetrie, i když bude zachycena radiálně. Běžná past bývá konečná ve všech rozměrech, tedy i v z -ovém směru je nutné, aby byl pohyb částic omezen do nějaké oblasti, zajišťovat tedy jejich obrat. Tato problematika je prozkoumána zatím jen povrchně – přesné řešení pro nějakou konfiguraci elektrod se zatím nepodařilo najít, takže lze vycházet jen z kvalitativních zjištění numerických simulací. Ukázalo se, že obratu v trajektorii lze dosáhnout, pokud elektrody nejsou přesné válce, ale zužují se nebo rozšiřují (a přitom zachovávají pro každé z kruhový průřez). O jaký průběh by mělo jít, je předmětem budoucího zkoumání. Jisté se zdá být, že ve střední části musí být změna tohoto profilu jen velmi pozvolná, aby nenarušovala keplerovský pohyb v kolmém směru, a dále od středu taková, aby bylo možné zvrátit směr pohybu

²³ $\sin \beta_0$ by odpovídalo klouzání přesně podél povrchu jedné z elektrod

²⁴nebo pozitrony a antiprotony za vzniku antivodíku

²⁵pokud vykazují permanentní dipól

částic s co nejširším spektrem $v_{0(z)}$. Možností také je použít systém jako transportní linku.

2.6 Selhání lineární i kubické lokální interpolace polní mapy pro částici s elektrickým dipólem

Pokud je konfigurace elektrod taková, že neumožňuje najít přesné řešení jako výše, přistupuje se obvykle k numerickým simulacím. Takto by se (pro srovnání) postupovalo při integraci pohybu nabitě částice: Pole může být zadáno buď rovnicí $\vec{E} = (E_X(X, Y, Z), E_Y(X, Y, Z), E_Z(X, Y, Z))^T$, nebo mapou, tj. konečnou množinou hodnot v určitých uzlech, obvykle pravidelně uspořádaných, čemuž je vhodné uzpůsobit i volby souřadných os tak, aby tyto směřovaly ve směrech pravidelného uspořádání uzlů. Nechť pro jednoduchost má pole tak vysokou symetrii, že je popsáno jen jednou nenulovou složkou E a jedinou skalární proměnnou X (jako třeba u válcové symetrie řešené výše), $E = E(X)$. Uzly, ve kterých je hodnota pole udána, nechť jsou $X_n = n\Delta X, n \in (N_1, \dots, N_2), N_1, N_2 \in \mathbb{Z}, \Delta X > 0$ a hodnoty těchto uzlů nechť jsou E_n . Interpolace pole nechť je tato – nejprve je bod X lokalizován, do kterého z interválků $I_n \equiv \langle X_n, X_{n+1} \rangle = \langle n\Delta X, (n+1)\Delta X \rangle$ patří; pro daná n , E_n a E_{n+1} pak ať je definováno

$$E(X) = \frac{E_{n+1} - E_n}{\Delta X} (X - n\Delta X) + E_n, \forall X \in I_n. \quad (2.64)$$

Jedná se o prostou lineární interpolaci v rámci daného interválu. Uvnitř každého z nich je zobrazení zřejmě spojitě; a na krajích (v uzlech) rovněž, protože $\lim_{X \rightarrow (n+1)\Delta X} E(X) = E_{n+1}$. Výsledkem je tedy obecně lomená čára. Uvedené interpolační schéma je řešením soustavy rovnic

$$E_n = aX_n + b \quad (2.64a)$$

$$E_{n+1} = aX_{n+1} + b = a(X_n + \Delta X) + b \quad (2.65b)$$

pro koeficienty a a b lineární funkce.

Výše zkonstruované zobrazení ale (kromě velmi speciálních případů) nemá obecně spojitou první derivaci. Zřejmě se totiž nerovnají jednostranné derivace okolo uzlů:

$$\lim_{X \rightarrow (n+1)\Delta_-} \frac{dE}{dX} = \lim_{X \rightarrow (n+1)\Delta_-} \frac{E_{n+1} - E_n}{\Delta X} \quad (2.66a)$$

$$\lim_{X \rightarrow (n+1)\Delta_+} \frac{dE}{dX} = \lim_{X \rightarrow (n+1)\Delta_+} \frac{E_{n+2} - E_{n+1}}{\Delta X} \quad (2.66b)$$

Rovnost obou výrazů zřejmě nastává, jen pokud jsou v rovině $X-E(X)$ body $(X_n, E_n)^T$, $(X_{n+1}, E_{n+1})^T$ a $(X_{n+2}, E_{n+2})^T$ v jedné přímce. To je přirozeným důsledkem toho, že lineární interpolace je "příliš hrubá". Při numerické integraci pohybu nabité částice v tomto poli ale nebudou odchylky od správného řešení příliš velké, pokud pole nemá velmi divoký průběh. Síla na nabitou částici je

$$\vec{F} = q\vec{E}, \quad (2.67)$$

tedy v jednom rozměru

$$F = qE, \quad (2.68)$$

a pohybová rovnice

$$M\ddot{X} = qE(X) \Rightarrow \ddot{X} = \frac{q}{M}E(X) \quad (2.69)$$

lze nejjednodušeji nahradit diferenciálním schématem s centrální diferencí

$$\begin{aligned} \frac{X(t + \Delta t) - 2X(t) + X(t - \Delta t)}{(\Delta t)^2} &= \frac{q}{M}E(X(t)) = \\ &= \frac{q}{M} \left(\frac{E_{n(t)+1} - E_{n(t)}}{\Delta X} (X - n(t)\Delta X) + E_{n(t)} \right), \end{aligned} \quad (2.70)$$

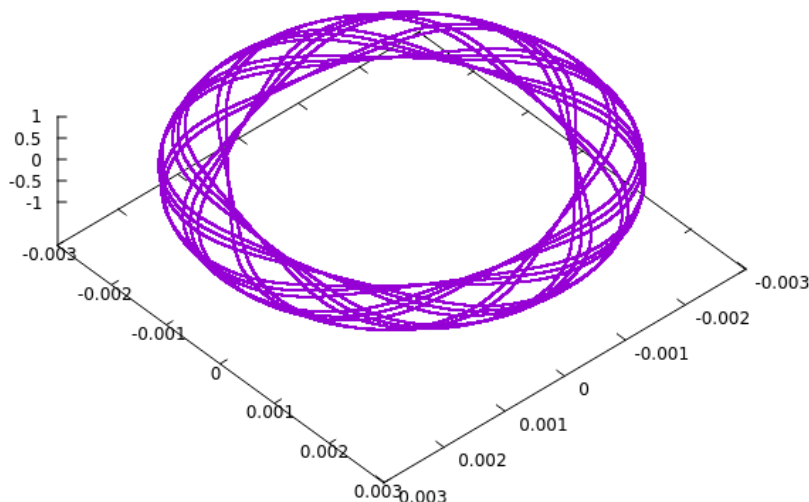
kde $n(t)$ značí n -tý interválek I_n , ve kterém se částice nachází v čase t . Výraz na pravé straně je spojitý, jak bylo řečeno a vliv skoků v první derivaci na integraci je potom obvykle zanedbatelný.

Jiná situace nastane pro pohyb dipólové částice. Její rovnice pohybu v jednom rozměru bude

$$\frac{d^2 X}{dt^2} = -\frac{\mu_e}{M} \cdot \frac{\partial E}{\partial X}, \quad (2.71)$$

kde už samozřejmě může při vyčíslení $X(t + \Delta t)$ nastat velká odchylka oproti přesnému řešení. Numerické simulace ve třech rozměrech pro přesně řešitelné pohyby – například v cylindricky uspořádaných elektrodách – tuto domněnku potvrzují: typicky dochází k nepředvídaným a nefyzikálním zvratům do té doby řádné trajektorie, paradoxně nejčastěji v místech, kde má pole malou hodnotu²⁶. Příklad takové chybné simulace je na Obr. 2.4. Interpolační schéma je tedy nutno nahradit lepším, které zařídí, že rekonstruované pole bude spojitě i do první derivace.

²⁶ což už není paradoxní, je-li vzato v potaz, že v těch místech může být velká relativní změna první derivace při nevhodné interpolaci

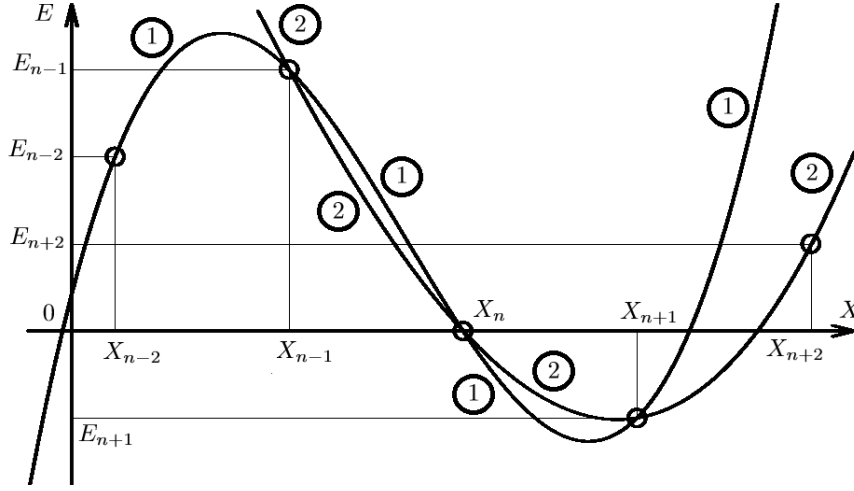


Obr. 2.4: Důsledek příliš hrubé interpolace polní mapy v perspektivním pohledu – částice by se měla pohybovat po elipse, ale od určitého času počínaje se od tohoto pohybu odchýlí a nefyzikální trajektorie pak připomíná efekt stáčení perihelia. Pohyb může být perturbován samozřejmě i kolmo na rovinu.

Zřejmě nepraktickým postupem se ukazuje proložení polynomem celé mapy, což je jednak výpočetně náročné a jednak náchylné ke kumulaci numerických chyb; je proto vhodné držet se idey lokální interpolace. V platnosti zůstává způsob lokalizace bodu X , pro něhož se má pole interpolovat, do intervalu $\langle X_n, X_{n+1} \rangle$, je ale zároveň vhodné rozšíření množiny bodů, podle kterých se interpolace provede, z dvojice $\{X_n, X_{n+1}\}$ na čtveřici $\{X_{n-1}, X_n, X_{n+1}, X_{n+2}\}$. Je vhodné upozornit na omyl, kterého se lze snadno dopustit: pokud by se proložily hodnoty E_n v těchto čtyřech po sobě jdoucích (a ekvidistantně vzdálených) bodech, polynomem stupně až tři, výsledná funkce by sice spojitá byla jako v konstrukci popsané výše, ale derivace by byla spojitá jen zdánlivě – rameno funkce v intervalu $\langle X_{n-1}, X_n \rangle$ sice navazuje spojitě i v první derivaci na interpolaci v intervalu $\langle X_n, X_{n+1} \rangle$, ale pro interpolaci v něm se má použít čtveřice bodů X_{n-2} , X_{n-1} , X_n a X_{n+1} a ve výsledku se pouze lomená čára z předchozí konstrukce nahradí "lomenou kubickou parabolou", která je opět v uzlech v první derivaci spojitá jen náhodou²⁷;

²⁷možným systematickým navázáním první derivace v uzlech může být po částech lineární čára, která

(nevhodnou) interpolaci kubickými parabolami demonstruje Obr. 2.5.



Obr. 2.5: Prokládání polní mapy polynomem stupně až tři, které spojitost prvních derivací nezaručí. Cílem je interpolovat pole ve dvou intervalech – $\langle X_{n-1}, X_n \rangle$ a $\langle X_n, X_{n+1} \rangle$ – vždy pomocí čtveřice bodů polní mapy. Interpolace v $\langle X_{n-1}, X_n \rangle$ se dosahuje prokladem polynomu stupně až tři tak, aby procházel čtveřicí bodů $(X_{n-2}, E_{n-2})^T$, $(X_{n-1}, E_{n-1})^T$, $(X_n, E_n)^T$ a $(X_{n+1}, E_{n+1})^T$, a výsledkem je křivka "1"; podobně se nalezne křivka "2" z bodů $(X_{n-1}, E_{n-1})^T$, $(X_n, E_n)^T$, $(X_{n+1}, E_{n+1})^T$ a $(X_{n+2}, E_{n+2})^T$ jako interpolace pro interval $\langle X_n, X_{n+1} \rangle$. Je zřejmé, že ke spojitému navázání derivací nedochází, protože křivky "1" a "2" mají v bodě X_n obecně jiné směrnice, jedná se proto vlastně o "lomenou kubickou parabolu".

2.7 Konstrukce lokální interpolace polní mapy spojitě do první derivace včetně

Jednoduché lokální interpolační schéma, které vyhoví požadavkům spojitého navázání až do první derivace, je následující: Pro interpolaci v intervalu $\langle X_n, X_{n+1} \rangle$ se vychází ze čtveřice $\{X_{n-1}, X_n, X_{n+1}, X_{n+2}\}$ a interpolace se hledá jako polynom stupně až tři, ale nepožaduje se, aby tento procházel body $(X_{n-1}, E_{n-1})^T$ a $(X_{n+2}, E_{n+2})^T$, pouze $(X_n, E_n)^T$ a $(X_{n+1}, E_{n+1})^T$. Protnutí posledních dvou jmenovaných bodů zaručí navá-

bude lomená nikoliv v uzlech, ale mezi nimi – potom v uzlech je interpolace spojitá i v první derivaci, ale skok se logicky přenesl dovnitř interválů, což problém opět neřeší

zání hodnot funkce. Navázání prvních derivací se provede předepsání prvních centrálních diferencí v bodech X_n a X_{n+1} , tedy

$$E'(X_n) = \frac{E_{n+1} - E_{n-1}}{2\Delta X}, \quad (2.72a)$$

$$E'(X_{n+1}) = \frac{E_{n+2} - E_n}{2\Delta X}. \quad (2.72b)$$

Že se spojitě navazují i první derivace, je zřejmé, protože formule pro výpočet derivací v sousedních intervalech jsou pro uzly, kde se stýkají, identické (pro jejich výpočet jsou použity stejné hodnoty).

Stejně jako u schématu lomené čáry bude potřeba najít koeficienty polynomu

$$E(X) = aX^3 + bX^2 + cX + d \quad (2.73)$$

ze soustavy rovnic určené podmínkami konstrukce. Protože

$$E'(X) = 3aX^2 + 2bX + c, \quad (2.74)$$

bude soustava dána jako

$$E_n = aX_n^3 + bX_n^2 + cX_n + d \quad (2.75a)$$

$$E_{n+1} = aX_{n+1}^3 + bX_{n+1}^2 + cX_{n+1} + d \quad (2.75b)$$

$$\frac{E_{n+1} - E_{n-1}}{2\Delta X} = 3aX_n^2 + 2bX_n + c \quad (2.75c)$$

$$\frac{E_{n+2} - E_n}{2\Delta X} = 3aX_{n+1}^2 + 2bX_{n+1} + c, \quad (2.75d)$$

neboli

$$E_n = a(X_{n-1} + \Delta X)^3 + b(X_{n-1} + \Delta X)^2 + c(X_{n-1} + \Delta X) + d \quad (2.76a)$$

$$E_{n+1} = a(X_{n-1} + 2\Delta X)^3 + b(X_{n-1} + 2\Delta X)^2 + c(X_{n-1} + 2\Delta X) + d \quad (2.76b)$$

$$\frac{E_{n+1} - E_{n-1}}{2\Delta X} = 3a(X_{n-1} + \Delta X)^2 + 2b(X_{n-1} + \Delta X) + c \quad (2.76c)$$

$$\frac{E_{n+2} - E_n}{2\Delta X} = 3a(X_{n-1} + 2\Delta X)^2 + 2b(X_{n-1} + 2\Delta X) + c, \quad (2.76d)$$

kde neznámými jsou přirozeně koeficienty a , b , c a d .

Alternativně lze v rámci intervalu napojovat polynom stupně až tři (uprostřed – v $\langle X_n + \frac{\Delta X}{4}, X_{n+1} - \frac{\Delta X}{4} \rangle$) a po stranách (v $\langle X_n, X_n + \frac{\Delta X}{4} \rangle$ a $\langle X_{n+1} - \frac{\Delta X}{4}, X_{n+1} \rangle$) dvě přímký. Výhodou tohoto přístupu je, že se v počítači pro (nominálně) polovinu případů

počítají jen mnohem jednodušší přímková interpolace. Po technické stránce se body navázání derivací přesouvají z okrajů interválků I_n do jejich vnitřků. Interpolace je tedy dána jako

$$E(X) = \begin{cases} a_L X + b_L, & X \in \langle X_n, X_n + \frac{\Delta X}{4} \rangle \\ aX^3 + bX^2 + cX + d, & X \in \langle X_n + \frac{\Delta X}{4}, X_{n+1} - \frac{\Delta X}{4} \rangle \\ a_R X + b_R, & X \in \langle X_{n+1} - \frac{\Delta X}{4}, X_{n+1} \rangle \end{cases}, \quad (2.77)$$

kde koeficienty jsou dány rovnicemi

$$a_L = \frac{X_{n+1} - X_{n-1}}{2\Delta X} \quad (2.78a)$$

$$E_n = a_L X_n + b_L \quad (2.78b)$$

$$\begin{aligned} & a_L \left(X_{n-1} + \frac{5\Delta X}{4} \right) + b_L = \\ & = a \left(X_{n-1} + \frac{5\Delta X}{4} \right)^3 + b \left(X_{n-1} + \frac{5\Delta X}{4} \right)^2 + c \left(X_{n-1} + \frac{5\Delta X}{4} \right) + d \end{aligned} \quad (2.78c)$$

$$\begin{aligned} & a_R \left(X_{n-1} + \frac{7\Delta X}{4} \right) + b_R = \\ & = a \left(X_{n-1} + \frac{7\Delta X}{4} \right)^3 + b \left(X_{n-1} + \frac{7\Delta X}{4} \right)^2 + c \left(X_{n-1} + \frac{7\Delta X}{4} \right) + d \end{aligned} \quad (2.78d)$$

$$\frac{E_{n+1} - E_{n-1}}{2\Delta X} = 3a \left(X_{n-1} + \frac{5\Delta X}{4} \right)^2 + 2b \left(X_{n-1} + \frac{5\Delta X}{4} \right) + c \quad (2.78e)$$

$$\frac{E_{n+2} - E_n}{2\Delta X} = 3a \left(X_{n-1} + \frac{7\Delta X}{4} \right)^2 + 2b \left(X_{n-1} + \frac{7\Delta X}{4} \right) + c \quad (2.78f)$$

$$a_R = \frac{X_{n+2} - X_n}{2\Delta X} \quad (2.78g)$$

$$E_{n+1} = a_R X_{n+1} + b_R. \quad (2.78h)$$

Řešením soustavy je

$$a_L = \frac{X_{n+1} - X_{n-1}}{2\Delta X} \quad (2.79a)$$

$$b_L = E_n - \frac{E_{n+1} - E_{n-1}}{2\Delta} (X_{n-1} + \Delta X) \quad (2.79b)$$

$$a = \frac{4}{(\Delta X)^3} (E_{n+2} - 3E_{n+1} + 3E_n - E_{n-1}) \quad (2.79c)$$

$$b = \frac{1}{2(\Delta X)^2} (3E_{n+2} - 7E_{n+1} + 5E_n - E_{n-1}) + \\ + \frac{1}{(\Delta X)^3} (12X_{n-1} + 19\Delta X) (E_{n-1} - 3E_n + 3E_{n+1} - E_{n+2}) \quad (2.79d)$$

$$c = \frac{E_{n+2} - E_n}{2\Delta X} + \frac{1}{4(\Delta X)^2} (4X_{n-1} + 7\Delta X) (E_{n-1} - 5E_n + 7E_{n+1} - 3E_{n+2}) + \\ + \frac{1}{4(\Delta X)^3} (4X_{n-1} + 7\Delta X) (12X_{n-1} + 17\Delta X) (E_{n+2} - 3E_{n+1} + 3E_n - E_{n-1}) \quad (2.79e)$$

$$d = E_{n+1} + (X_{n-1} + 2\Delta X) \frac{E_n - E_{n+2}}{2\Delta X} + \\ + \frac{1}{32(\Delta X)^2} (4X_{n-1} + 7\Delta X)^2 (3E_{n+2} - 7E_{n+1} + 5E_n - E_{n-1}) + \\ + \frac{1}{16(\Delta X)^3} (4X_{n-1} + 5\Delta X) (4X_{n-1} + 7\Delta X)^2 (E_{n-1} - 3E_n + 3E_{n+1} - E_{n+2}) \quad (2.79f)$$

$$a_R = \frac{X_{n+2} - X_n}{2\Delta X} \quad (2.79g)$$

$$b_R = E_{n+1} - \frac{E_{n+2} - E_n}{2\Delta X} (X_{n-1} + 2\Delta X). \quad (2.79h)$$

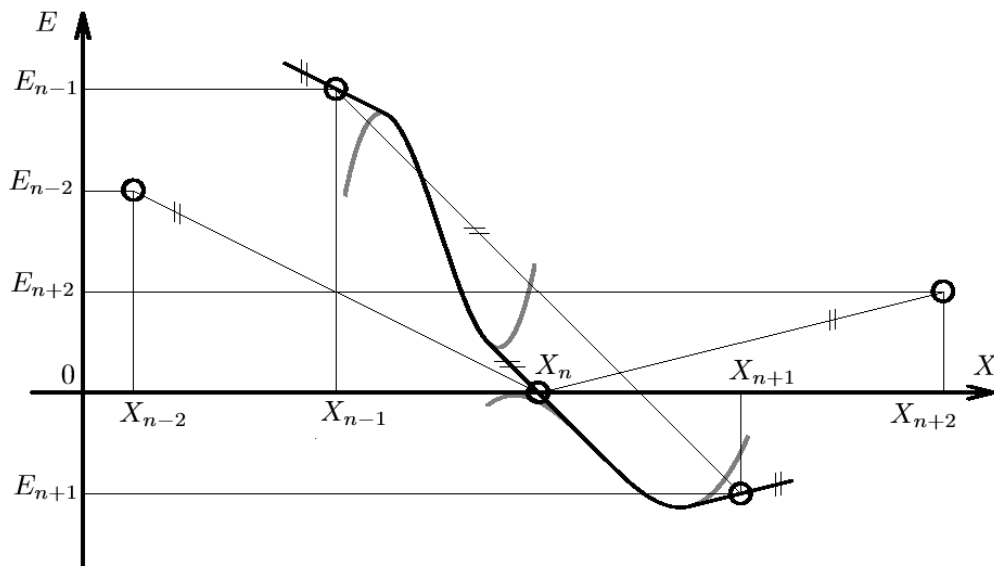
Řádné navázání interpolace až do první derivace včetně ilustruje 2.6.

2.8 Rozbor interpolačního schématu

Jako kontrola správnosti může posloužit například případ, kdy je ve všech čtyřech bodech stejná hodnota, tedy $E_{n-1} = E_n = E_{n+1} = E_{n+2}$ a kdy by měla vyjít konstantní funkce o hodnotě E_{n-1} , což se opravdu děje. Obecněji pro čtyři body ležící v jedné přímce musí vyjít interpolací přímka, tedy nutně musí být koeficienty a a b nulové – vskutku, pro první z nich je

$$a = \frac{4}{(\Delta X)^3} (E_{n-1} + 3\Delta E - 3(E_{n-1} + 2\Delta E) + 3(E_{n-1} + \Delta E) - E_{n-1}) = 0 \quad (2.80)$$

a podobně pro b ; směrnice přímky by měla být $c = \frac{\Delta E}{\Delta X}$, což je rovněž snadné ověřit; a konečně koeficient posunu by měl vyjít $d = E_{n-1} - \frac{\Delta E}{\Delta X} X_{n-1}$, a i ten je interpolací potvrzen. Jiné testy už jsou samozřejmě náročnější.



Obr. 2.6: Lokální interpolace polní mapy, která je všude spojitá včetně první derivace. Interpolace v intervalu $\langle X_{n-1}, X_n \rangle$ vychází ze čtveřice bodů $(X_{n-2}, E_{n-2})^T$, $(X_{n-1}, E_{n-1})^T$, $(X_n, E_n)^T$ a $(X_{n+1}, E_{n+1})^T$ – bodem (X_n, E_n) prochází přímka, jejíž směrnice je dána spojnicí bodů $(X_{n-1}, E_{n-1})^T$ a $(X_{n+1}, E_{n+1})^T$ (tato spojnice je tence vyznačena a zdůrazněna její rovnoběžnost s uvedenou přímkou); podobně se najde přímka procházející bodem $(X_{n-1}, E_{n-1})^T$ pomocí bodů $(X_{n-2}, E_{n-2})^T$ a $(X_n, E_n)^T$. Tyto přímky je uvnitř intervalu $\langle X_{n-1}, X_n \rangle$ možno navázat s polynomem stupně až tři tak, že výsledný útvar je spojitý až do první derivace včetně. Zopakuje-li se stejný postup pro interpolaci v intervalu $\langle X_n, X_{n+1} \rangle$, bude do první derivace včetně spojitý i navázání v bodě X_n , protože v něm obě čtveřice bodů předepisují stejnou přímku (body $(X_{n-1}, E_{n-1})^T$ a $(X_{n+1}, E_{n+1})^T$ patří do obou čtveřic). Šedivou barvou jsou naznačena pokračování polynomů stupně až tři v oblastech, kde už k nim ale přihlíženo není.

Pro válcově symetrické pole je nutné tuto jednorozměrnou interpolaci pro daný bod vykonávat čtyřikrát – je-li $\vec{E} = (E_r, E_\varphi, E_z)^T$, pak ve válcové symetrii bude $E_\varphi = 0$ a zbylé dvě složky závisí na radiální a axiální souřadnici, tedy

$$E_r = E_r(r, z) \quad (2.81a)$$

$$E_z = E_z(r, z). \quad (2.81b)$$

V dvourozměrné polní mapě, kdy je v každém z uzlů v rovině r - z zadáno jak E_r , tak E_z , pak stačí postupovat tak, že se pro dané r a z , tj. bod lokalizovaný do čtverce $\langle r_n, r_{n+1} \rangle \times \langle z_m, z_{m+1} \rangle$ naleznou nejprve interpolační hodnoty pole paralelně na hranách mříže mapy, tj. v bodech $(r, z_{m-1})^T$, $(r, z_m)^T$, $(r, z_{m+1})^T$ a $(r, z_{m+2})^T$ – např. $(r, z_{m-1})^T$ pomocí $(r_{n-1}, z_{m-1})^T$, $(r_n, z_{m-1})^T$, $(r_{n+1}, z_{m-1})^T$ a $(r_{n+2}, z_{m-1})^T$ apod. – a pomocí hodnot této čtveřice se konečně získají hodnoty $E_r(r, z)$ a $E_z(r, z)$ (pro obě složky samozřejmě musí výpočet proběhnout nezávisle)²⁸. Vzdálenosti uzlů v obou směrech, Δr a Δz , nemusí být stejné.

Pro osu r nejsou definovány záporné hodnoty, ale může nastat situace²⁹, kdy je potřeba interpolovat v $\langle 0, \Delta r \rangle$ pomocí bodu $r = -\Delta r$ – pak vzhledem k rotační symetrii stačí dodefinovat $E(-\Delta r) = E(+\Delta r)$.

Postup pro interpolaci v dvourozměrné mapě je podobný postupům, které se používají v počítačové grafice nebo v simulacích "Particle in Cell".

Samotnou interpolaci podle zkonstruovaného schématu je ještě před integrací pohybu dipólové částice vhodné otestovat na mapách, které vychází z elektrostatického pole známého průběhu – vezme se nějaké zvolené přesné řešení, z něho se vytvoří mapa, z mapy se interpolačním algoritmem pole zrekonstruuje a porovná s přesným řešením, ze kterého se vycházelo. Pro tento účel je tedy potřeba znát nějaké přesné řešení Poissonovy rovnice $\Delta\Phi = 0$ ve válcových souřadnicích. Jedno takové řešení s vysokou symetrií už bylo nalezeno – $\Phi(r) = C_1 + C_2 \ln r$ –, další partikulární řešení se najdou zkusmo:

Hledá-li se řešení ve tvaru $\Phi = \rho(r)\zeta(z)$, najde se speciální případ³⁰ $\Phi(r, z) = z \cdot \ln r$; pro tvar řešení $\Phi = \rho(r) + \zeta(z)$ se dá nalézt například $r^2 - 2z^2$; pro vysokou symetrii v proměnné z lze vzít například $\Phi = z$; a Poissonově rovnici ve válcových souřadnicích rovněž vyhovuje $\Phi = \frac{1}{2}zr^2 - \frac{1}{3}z^3$, což vychází z obecného tvaru $\Phi = \rho(r)z + \zeta(z)$. Shrnutí:

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= 1 & \Phi_3 &= r^2 - 2z^2 \\ \Phi_1 &= \ln \frac{r}{r_0} & \Phi_4 &= z \\ \Phi_2 &= z \ln \frac{r}{r_0} & \Phi_5 &= \frac{1}{2}zr^2 - \frac{1}{3}z^3 \end{aligned} \quad (2.82)$$

²⁸pokud by se nejprve hledaly $(r_{m-1}, z)^T$ a tak dále, tedy v opačném pořadí manipulace s osami, výsledek by byl stejný

²⁹pokud je poloměr vnitřní elektrody menší než vzdálenost uzlů mapy v radiálním směru

³⁰který se vyhýbá netriviálním Besselovým funkcím

Pro testování lze vzít libovolné

$$\Phi = \sum_{i=0}^5 C_i \Phi_i, C_i \in \mathbb{R} \quad (2.83)$$

takové, že na všech poloměrech je možné vtěsnat vnitřní a vnější elektrodu; r_0 je libovolná konstanta pouze pro ten účel, aby argument logaritmu byl bezrozměrný; a konstanty C_i samozřejmě musí mít správný fyzikální rozměr. Integrální nadplochy

$$\Phi(r, z) = \text{konst} \quad (2.84)$$

jsou potom ekvipotenciálami a v těchto případech je možné libovolnou takovou dvojici prohlásit za elektrody s konstantním potenciálem, které slouží jako okrajové podmínky.

Interpolační algoritmus vykazuje s přesným řešením velmi dobrou shodu. A konečně jeho použití pro integraci³¹ pohybu dipólové částice v poli zadaném mapou už nevykazuje nefyzikální chaotické změny pohybu jako při interpolaci mapy lomenou čarou.

O konkrétním přesném řešení (2.83) vykazujícím schopnost urychlení atomů ve směru osy válcové symetrie bude dále pojednáno v páté kapitole.

³¹ve schématu Runge-Kutta

Kapitola 3

Difrakce záření na rovinných clusterech rydbergovské hmoty

Tato kapitola se bude zabývat difrakčním spektrem elektromagnetického záření na clusterech rydbergovské hmoty. O hustotě elektronů v něm se bude po celou dobu předpokládat přiblížení, že se jedná o hexagonálně symetrickou funkci s periodou a v rámci clusteru. Jak bylo řečeno v úvodu, hexagonálně symetrická funkce s periodou a na omezené oblasti je zobecněním sudé a -periodické funkce jedné proměnné, proto je začátek této kapitoly věnován shrnutí podstatných vlastností této třídy funkcí a vyvozením závěrů, s jejichž zobecněními pro funkce hexagonálně symetrické s periodou a se bude dále pracovat. Periodické funkce lze obecně rozkládat do Fourierových řad s příslušnými koeficienty – kvantifikací těch vlastností difrakčních spekter, které na těchto koeficientech závisí (např. formfaktoru, intenzit difrakčních píků apod.), se ale tato kapitola nezabývá, proto se jim i výklad věnuje spíše okrajově, a to tam, kde je jich potřeba pro nalezení potřebných tvrzení.

3.1 Sudé funkce jedné proměnné; jejich Fourierovy rozvoje a Fourierovy obrazy

Spojité¹ reálná funkce reálné proměnné $n(x)$, která má nejmenší periodu a , tj.

$$\forall x \in \mathbb{R} : n(x) = n(x + a) \wedge (\forall \tilde{a} < a)(\exists x \in \mathbb{R}) : n(x) \neq n(x + \tilde{a}), \quad (3.1)$$

lze rozložit na součet periodických funkcí s periodami a , $\frac{a}{2}$, $\frac{a}{3}$ atd. ve formě

¹podle tzv. Jordanova kritéria konvergence

$$n(x) = \frac{C_0}{2} + \sum_{k=1}^{+\infty} \left[C_k \cos \frac{2\pi kx}{a} + S_k \sin \frac{2\pi kx}{a} \right], \quad (3.2)$$

kde koeficienty C_k a S_k jsou dány jako

$$C_k = \frac{2}{a} \int_{x_0}^{x_0+a} n(x') \cos \frac{2\pi kx'}{a} dx', k \in \mathbb{Z}_0^+ \quad (3.3a)$$

$$S_k = \frac{2}{a} \int_{x_0}^{x_0+a} n(x') \sin \frac{2\pi kx'}{a} dx', k \in \mathbb{Z}^+. \quad (3.3b)$$

Na volbě x_0 právě díky a -periodičnosti nezáleží. Rozklad se nazývá Fourierovou řadou funkce $n(x)$. Faktor $\frac{2\pi}{a}$ zaručuje nejen správnou a -periodicitu, ale i bezrozměrnost argumentů funkcí sinus a kosinus. Formálně lze výše uvedené vztahy pro koeficienty rozvoje rozšířit na množinu celých čísel – $S_0 = 0$, $C_{-k} = C_k$ a $S_{-k} = -S_k$. S tímto rozšířením a podle relace $e^{\pm i\alpha} = \cos \alpha \pm i \sin \alpha$ lze zavést do rozvoje exponenciely:

$$\begin{aligned} n(x) &= \frac{C_0}{2} + \frac{S_0}{2} + \sum_{k=1}^{+\infty} \left[C_k \cos \frac{2\pi kx}{a} + S_k \sin \frac{2\pi kx}{a} \right] = \\ &= \left(\frac{C_0}{2} + \frac{S_0}{2} \right) + \sum_{k=1}^{+\infty} \left[\frac{C_k + C_{-k}}{2} \cos \frac{2\pi kx}{a} + \frac{S_k - S_{-k}}{2} \sin \frac{2\pi kx}{a} \right] = \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left[\frac{C_k}{2} \cos \frac{2\pi kx}{a} + \frac{S_k}{2} \sin \frac{2\pi kx}{a} \right] = \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left[\frac{C_k}{4} \left(e^{+i\frac{2\pi kx}{a}} + e^{-i\frac{2\pi kx}{a}} \right) + \frac{S_k}{4i} \left(e^{+i\frac{2\pi kx}{a}} - e^{-i\frac{2\pi kx}{a}} \right) \right] = \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left(\frac{C_k}{4} + \frac{S_k}{4i} \right) e^{+i\frac{2\pi kx}{a}} + \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left(\frac{C_k}{4} - \frac{S_k}{4i} \right) e^{-i\frac{2\pi kx}{a}} = \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \left(\frac{C_{|k|}}{2} - i \cdot \operatorname{sgn}(k) \frac{S_{|k|}}{2} \right) e^{+i\frac{2\pi kx}{a}} = \sum_{k \in \mathbb{Z}} n_k e^{+i\frac{2\pi kx}{a}} \end{aligned} \quad (3.4)$$

kde tedy bylo zavedeno

$$\forall k \in \mathbb{Z} : n_k \equiv \frac{C_{|k|}}{2} + i \cdot \operatorname{sgn}(k) \frac{S_{|k|}}{2} \left(= \frac{1}{a} \int_{z_0}^{z_0+a} n(x') e^{-i\frac{2\pi kx'}{a}} dx' \right), \quad (3.5)$$

kde sgn značí funkci signum a kde suma probíhá tentokrát přes všechna celá čísla. Kosiny, siny a exponenciely se v tomto smyslu nazývají bazické funkce (Fourierova rozvoje).

Argument exponenciely lze zkrátit substitucí

$$G \equiv \frac{2\pi}{a}k, k \in \mathbb{Z}, \quad (3.6)$$

na

$$n(x) = \sum_{G=\frac{2\pi}{a}k, k \in \mathbb{Z}} n_G e^{+iGx}. \quad (3.7)$$

Substituce ale není dokonalá v tom smyslu, že se veličina G na množinu $k \in \mathbb{Z}$ v sumě odvolává. Nápravu zařídí definování množiny, kterou G musí probíhat, způsobem nezávislým na k . Nechť je množina označena jako M_a . Ukazuje se, že (bez ohledu na konkrétní průběh funkce $n(x)$ v rámci jedné periody) musí G probíhat právě takovou množinou, aby zajistila a -periodičnost funkce $n(x)$. Musí totiž platit podmínka periodičnosti

$$\forall K \in \mathbb{Z} : \sum_{G \in M_a} n_G e^{+iGx} = n(x) = n(x + Ka) = \sum_{G \in M_a} n_G e^{+iGz} e^{+iGKa}, \quad (3.8)$$

z níž porovnáním obou sum plyne

$$0 = \sum_{G \in M_a} n_G e^{+iGx} (e^{+iGKa} - 1). \quad (3.9)$$

Závorka je vytknutá pro každé G zvlášť, a tedy pro každé G musí být výraz v závorce nulový². Musí tedy

$$1 = e^{+iGKa} \Rightarrow GKa = 2\pi N, N \in \mathbb{Z} \Rightarrow \left(\frac{a}{2\pi}\right) GK \in \mathbb{Z}. \quad (3.10)$$

Protože je K libovolné, ale pevné celé číslo a jeho součin s $\frac{a}{2\pi}G$ musí být rovněž celočíselný, musí být $G = \frac{2\pi}{a}k, k \in \mathbb{Z}$, kde zlomek jako předfaktor "ruší" vliv zlomku $\frac{a}{2\pi}$ v (3.10), a k musí náležet množině všech celých čísel³. Zkoumaná množina M_a odpovídá substituci (3.6), lze tedy opravdu bez odkazování se na k pro každou a -periodickou funkci psát

$$n(x) = \sum_{G \in M_a} n_G e^{+iGx} \quad (3.11)$$

s definicí, že M_a je právě taková množina, aby $\sum_{G \in M_a} n_G e^{+iGx}$ byla a -periodická funkce. Množina M_a se nazývá reciprokou množinou k a -periodickým funkcím:

²pokud by byly nulové jen některé, platila by podmínka periodičnosti jen pro speciální třídy funkcí $n(x)$

³pokud by byla zvolena jen nějaká podmnožina, určitě by existovalo takové K , aby podmínka (3.10) neplatila, a pro každé G mimo tuto množinu platí podmínka (3.10) jen náhodou

$$M_a = \left\{ G = \frac{2\pi}{a}k \mid k \in \mathbb{Z} \right\} \quad (3.12)$$

- Reciproká množina nezávisí na konkrétním průběhu a -periodické funkce $n(x)$, ale jen na její periodě – všechny funkce se stejnou periodou a mají i stejnou reciprokou množinu.
- Reciprokou množinu nezmění translace proměnné (souřadnice) x (tj. jiná volba počátku osy x).
- Ze substituce (3.6) je zřejmé, že G má fyzikální rozměr m^{-1} , je-li $[a] = \text{m}$.
- Pro koeficienty v (3.4), (3.7) a (3.11) platí, že $k \neq G$, ale $n_k = n_G = n_{\frac{2\pi}{a}k}$.
- Přestože obecně $n_G \in \mathbb{C}$, $e^{iGx} \in \mathbb{C}$, dokonce i $n_G e^{iGx} \in \mathbb{C}$, jejich celý součet už ale reálnou a -periodickou funkci je.

Dva uvedené způsoby zápisu rozvoje periodické funkce do bazických funkcí – kosinovo-sinové a komplexně-exponenciální – mají své výhody i nevýhody⁴, nejsou ale jedinými možnými. Je-li funkce $n(x)$ sudá⁵, jsou všechny koeficienty S_k nulové a kosiny jdou přeuspořádat tak, aby sčítací index tentokrát probíhal množinu všech clých čísel, na:

$$n(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{C_{-k} + C_k}{2} \cos \frac{2\pi kx}{a} = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \tilde{C}_k \cos \frac{2\pi kx}{a}, \quad (3.13)$$

kde ovšem

$$\tilde{C}_k = \frac{2}{a} \int_0^{+\frac{a}{2}} n(x') \cos \frac{2\pi kx'}{a} dx', \quad (3.14)$$

Tento rozklad bude využit v následujících (pod)kapitolách. V jazyku prvků reciproké množiny $G \in M_a$ potom (3.13) a (3.14) nabývají podoby

$$n(x) = \sum_{G \in M_a} \tilde{C}_G \cos Gx, \quad (3.15a)$$

$$\tilde{C}_G = \frac{2}{a} \int_0^{+\frac{a}{2}} n(x') \cos Gx' dx'. \quad (3.15b)$$

⁴kosinovo-sinové má intuitivnější interpretaci, avšak mnohem hůře se s ním algebraicky pracuje, protože (mimo jiné) množina, přes kterou probíhají indexy, není uzavřená vůči jejich sčítání a odečítání a vůbec používá dvou různých funkcí; naopak pro komplexně-exponenciální

⁵nebo lze-li sudou učinit vhodnou volbou počátku osy x

Výhodou čistě kosinového rozkladu pro sudé funkce je příznivý tvar důležitých goniometrických vztahů, které obsahují právě jen kosiny:

$$\cos \alpha \cos \beta = \frac{1}{2} (\cos(\alpha + \beta) + \cos(\alpha - \beta)) \quad (3.16a)$$

$$\cos \alpha + \cos \beta = 2 \cos \frac{\alpha + \beta}{2} \cos \frac{\alpha - \beta}{2} \quad (3.16b)$$

Tyto vztahy budou mít zvláštního významu pro Fourierův rozklad funkcí více proměnných (ve více rozměrech), např. a -periodických s hexagonální symetrií, až budou v argumentech kosinů skalární součiny vektorů.

Jen pro zajímavost budiž uvedeno, že rozvoj pouze s kosiny a s indexem probíhajícím množinu celých čísel lze zkonstruovat i pro funkce, které nejsou nutně sudé, využije-li se např. fázového posunutí $\sin \alpha = \cos(\frac{\pi}{2} - \alpha)$:

$$n(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \tilde{C}_k \cos \left(\frac{2\pi kx}{a} + \frac{\pi}{4} - \operatorname{sgn}(k) \frac{\pi}{4} \right), \quad (3.17)$$

kde

$$\tilde{C}_k = \begin{cases} S_k, k < 0 \\ \frac{C_0}{\sqrt{2}}, k = 0 \\ C_k, k > 0. \end{cases} \quad (3.18)$$

Praktické výhody počítání s takovým rozkladem jsou ale otázkou.

Nyní budou vyšetřeny tři konkrétní sudé a -periodické funkce jedné reálné proměnné – nekonečný Diracův hřeben, konečný Diracův hřeben a jednoduchá modelová funkce jako jakási první iterace k nekonečnému Diracovu hřebenu.

Jako posledně jmenovaná by měla být zvolena pokud možno co nejjednodušší sudá, a -periodická, (bez újmy na obecnosti) nezáporná funkce taková, aby měla výrazná maxima v bodech Kx , $K \in \mathbb{Z}$ a jinde byla naopak blízká nule. Takovou funkcí může být

$$n(x) = \left(\cos \frac{\pi x}{a} \right)^2 \quad (3.19)$$

Funkce má minima přímo rovná nule uprostřed mezi maximy. Její rozklad do Fourierovy řady je snadný:

$$\tilde{C}_k = \frac{2}{a} \int_0^{+\frac{a}{2}} \left(\cos \frac{\pi x}{a} \right)^2 \cos \frac{2\pi kx}{a} dx =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{a} \left(\left[\frac{1}{2} \cdot \frac{a}{2\pi(1+k)} \cos \frac{2\pi(1+k)x}{a} \right]_0^{+\frac{a}{2}} + \left[\frac{a}{2\pi k} \sin \frac{2\pi kx}{a} \right]_0^{+\frac{a}{2}} + \right. \\
&\left. + \left[\frac{1}{2} \cdot \frac{a}{2\pi(1-k)} \sin \frac{2\pi(1-k)x}{a} \right]_0^{+\frac{a}{2}} \right) = 0, k \in \mathbb{Z}, k \neq 0, \pm 1, \quad (3.20a)
\end{aligned}$$

$$\tilde{C}_0 = \frac{2}{a} \int_0^{+\frac{a}{2}} \left(\cos \frac{\pi x}{a} \right)^2 dx = \frac{1}{2}, \quad (3.20b)$$

$$\tilde{C}_{\pm 1} = \frac{2}{a} \int_0^{+\frac{a}{2}} \left(\cos \frac{\pi x}{a} \right)^2 \cos \frac{2\pi(\pm 1)x}{a} dx = \frac{1}{4}, \quad (3.20c)$$

je tedy

$$n(x) = \left(\cos \frac{\pi x}{a} \right)^2 = \frac{1}{4} \cos \frac{2\pi(-1)x}{a} + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \cos \frac{2\pi(+1)x}{a}, \quad (3.21)$$

neboli

$$\left(\cos \frac{\pi x}{a} \right)^2 = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \tilde{C}_k \cos \frac{2\pi kx}{a}, \tilde{C}_0 = \frac{1}{2}, \tilde{C}_{\pm 1} = \frac{1}{4}, \tilde{C}_k = 0, k \neq 0, \pm 1, \quad (3.22)$$

k čemuž se v případě této funkce lze dopracovat mnohem rychleji pomocí jednoduchých goniometrických vzorců:

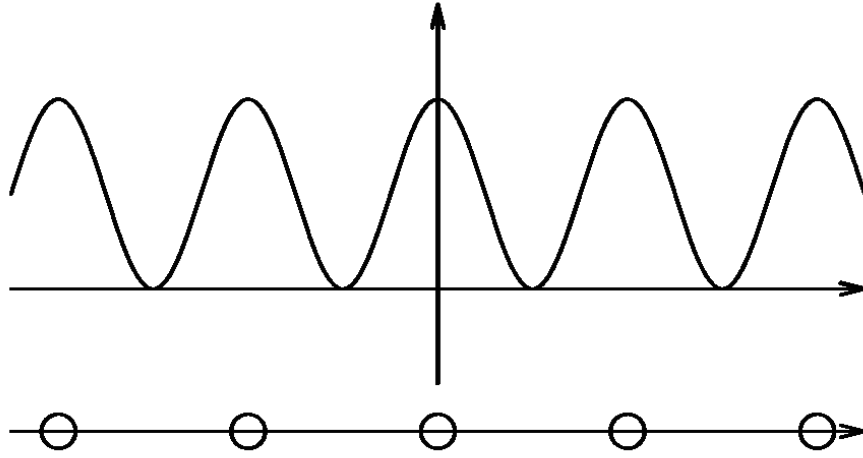
$$n(x) = \left(\cos \frac{\pi x}{a} \right)^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \cos \frac{2\pi x}{a} \right) = \frac{1}{4} \cos \frac{2\pi(-1)x}{a} + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \cos \frac{2\pi(+1)x}{a} \quad (3.23)$$

Průběh funkce je na Obr. 3.1 včetně zjednodušeného schématu, který označuje pouze zvolený periodicky se opakující prvek funkce (zde maxima).

Diracův hřeben je periodicky se opakující delta distribuce, přesněji řečeno součet nespočetně mnoha jednoduchých delta distribucí s navzájem periodicky posunutými body nespojitosti (tzv. uzly):

$$D(x) = \sum_{N \in \mathbb{Z}} \delta(x - Na) \quad (3.24)$$

Uzly $x = Na, N \in \mathbb{Z}$ můžou představovat např. polohy jader v řetízku atomů a lze předpokládat, že elektronová hustota v tomto řetízku bude mít stejnou periodu jako rozdělení jader. Rozklad $D(x)$ do Fourierovy řady se pak podle (3.5) najde vypočtením koeficientů rozkladu:



Obr. 3.1: Funkce $n(x) = \left(\frac{\pi x}{a}\right)^2$ jako hrubá iterace k nekonečnému Diracovu hřebenu a modelová sudá a -periodická funkce. V dolní polovině obrázku je její "jednorozměrné" symbolické znázornění, ve kterém jsou na ose x vyznačena pouze periodicky se opakující maxima v bodech $Ka, K \in \mathbb{Z}$ – stejné symbolické znázornění by měl i Diracův hřeben $D(x) = \sum_{K \in \mathbb{Z}} \delta(x - Ka)$.

$$\begin{aligned}
 n_k &= \frac{1}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \left(\sum_{N \in \mathbb{Z}} \delta(x' - Na) \right) e^{-i \frac{2\pi k x'}{a}} dx' = \frac{1}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \delta(x') e^{-i \frac{2\pi k x'}{a}} dx' = \\
 &= \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x') e^{-i \frac{2\pi k x'}{a}} dx' = \frac{1}{a} \mathcal{F}[\delta(x')](k) = \frac{1}{a} \cdot 1 = \frac{1}{a}, \quad (3.25)
 \end{aligned}$$

kde $\mathcal{F}[\delta(x)](k)$ je s výhodou použitá Fourierova transformace delta funkce (o ní pojednávají následující odstavce) jako funkce (zespojité) proměnné k díky formální shodě její definice s integrálem v (3.25). Koeficienty rozvoje na k ve výsledku shodou okolností nezávisí. Je tedy

$$D(x) \equiv \sum_{N \in \mathbb{Z}} \delta(x - Na) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{1}{a} e^{i \frac{2\pi k x}{a}}. \quad (3.26)$$

Sesterskou operací k rozkladu (zde zobecněné) funkce do Fourierovy řady je její Fourierova transformace, neboli její obraz v recipročním prostoru. Fourierova transformace v reciproké proměnné ξ je pro funkci $n(x)$ definovaná jako

$$\mathcal{F}[n(x)](\xi) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} n(x) e^{-i2\pi\xi x} dx, \quad (3.27)$$

což je formálně stejný výraz jako pro koeficienty (3.5) – vskutku: Fourierův obraz lze chápat jako degenerovaný rozvoj do Fourierovy řady pro funkci, jejíž perioda jde limitně do nekonečna, tj. o periodičnost přichází⁶. Proto je Fourierův obraz použitelný pro mnohem větší třídu (i neperiodických) funkcí.

Diracův hřeben $D(x)$ periodický je a jeho Fourierův obraz lze nalézt buď přímo z jeho definice (3.27), nebo z jeho rozkladu do Fourierovy řady s koeficienty (3.26) – mezi oběma vyjádřeními platí samozřejmě rovnost podle (3.26). Fourierův obraz přímo z definice je

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[D(x)](\xi) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{N \in \mathbb{Z}} \delta(x - Na) \right) e^{-i2\pi\xi x} dx = \\ &= \sum_{N \in \mathbb{Z}} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - Na) e^{-i2\pi\xi x} dx \right) = \\ &= \sum_{N \in \mathbb{Z}} 2\pi e^{-i2\pi Na\xi} = [\text{podle (3.26)}] = \frac{2\pi}{a} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta\left(\xi - \frac{n}{a}\right) = \\ &= [\Lambda \equiv 2\pi\xi] = \frac{2\pi}{a} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta\left(\Lambda - \frac{2\pi}{a}n\right) = \frac{2\pi}{a} \sum_{G \in M_a} \delta(\Lambda - G), \end{aligned} \quad (3.28)$$

kde argumenty delta funkcí mají rozměr stejný jako reciproká vzdálenost a v posledním řádku byla vlastní reciproká vzdálenost ξ nahrazena přeškálovanou⁷ reciprokou vzdáleností $\Lambda \equiv 2\pi\xi$ ("vlnovým číslem") pro lepší porovnání s prvky množiny M_a . Fourierův obraz $D(x)$ rozložené do Fourierovy řady podle (16) musí dát stejný výsledek a opravdu:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[D(x)](\xi) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{a} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi n x}{a}} \right) e^{-i2\pi\xi x} dx = \\ &= \frac{1}{a} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} 1 \cdot e^{-i2\pi(\xi - \frac{n}{a})x} dx \right) = \frac{1}{a} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta\left(\xi - \frac{n}{a}\right) = \\ &= \frac{2\pi}{a} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta\left(\Lambda - \frac{2\pi}{a}n\right) = \frac{2\pi}{a} \sum_{G \in M_a} \delta(\Lambda - G) \end{aligned} \quad (3.29)$$

Fourierovým obrazem Diracova hřebenu v (přímém) prostoru je tedy Diracův hřeben v reciprokém prostoru. Navíc je evidentní, že reciproký Diracův hřeben je nenulový (má uzly) právě jen v bodech reciproké množiny pro a -periodickou funkci.

⁶zřejmější toto tvrzení je, když se v (3.5) zvolí integrační meze symetricky – $\int_{x_0 - \frac{a}{2}}^{\tilde{x}_0 + \frac{a}{2}} \dots$

⁷škálu pro popis reciprokého prostoru je možno samozřejmě zvolit libovolně

Konečně poslední z trojice funkcí je omezený Diracův hřeben, tj. série delta funkcí jako ve (3.24), ale omezená na konečnou oblast, např. (symetricky)

$$\tilde{D}(x) \equiv \sum_{N=-P}^{+P} \delta(x - Na). \quad (3.30)$$

Pro ni nelze použít druhý z výše uvedených postupů jako u nekonečného Diracova hřebene, protože (3.30) od nekonečna do nekonečna periodická není⁸, a tedy k ní rozklad do Fourierovy řady ani neexistuje; Fourierův obraz neupravené funkce $\tilde{D}(x)$ ale vypočítat jde:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\tilde{D}(x)](\xi) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{N=-P}^{+P} \delta(x - Na) \right) e^{-i2\pi\xi x} dx = \\ &= \sum_{N=-P}^{+P} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - Na) e^{-i2\pi\xi x} dx \right) = \sum_{N=-P}^{+P} e^{-i2\pi Na\xi} = \\ &= \sum_{N=-P}^{+P} \left(e^{-i2\pi a\xi} \right)^N = \frac{1 - (e^{-i2\pi a\xi})^{2P+1}}{1 - e^{-i2\pi a\xi}} = \\ &= \left(e^{-i2\pi a\xi} \right)^P \cdot \frac{e^{+i2\pi(P+\frac{1}{2})a\xi} - e^{-i2\pi(P+\frac{1}{2})a\xi}}{2i} \cdot \frac{2i}{e^{+i2\pi\frac{1}{2}\cdot a\xi} - e^{-i2\pi\frac{1}{2}\cdot a\xi}} = [\Lambda = 2\pi\xi] = \\ &= (e^{-ia\Lambda})^P \cdot \frac{\sin(P+\frac{1}{2})a\Lambda}{\sin\frac{1}{2}a\Lambda} = e^{-iPa\Lambda} \cdot F(\Lambda) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Fourierovým obrazem funkce $\tilde{D}(x)$ je tedy součin (fázového) faktoru a funkce $F(\Lambda)$, o které lze snadno dokázat, že je $\frac{2\pi}{a}$ -periodická a sudá; $F(\Lambda) \equiv \frac{\sin(P+\frac{1}{2})a\Lambda}{\sin\frac{1}{2}a\Lambda}$ se někdy nazývá Dirichletův kernel. Funkci $F(\Lambda)$ lze spojitě dodefinovat v jejích nevlastních bodech (což jsou prvky reciproké množiny a zároveň body, v nichž (periodicky se opakující) funkce $F(G)$ nabývá globálních maxim) $\Lambda = \frac{2\pi}{a}k, k \in \mathbb{Z}$ jako

$$F\left(\frac{2\pi}{a}k\right) \equiv \lim_{\Lambda \rightarrow \frac{2\pi}{a}k} F(\Lambda) = 2N + 1. \quad (3.32)$$

Fourierovým obrazem funkce periodické jen na určité oblasti tedy je funkce periodická od nekonečna do nekonečna; kvantitativním rozdílem oproti funkci (3.24) je, že obrazem souboru delta funkcí nejsou delta funkce, ale omezené funkce $F(\Lambda)$ – pokud by ty byly

⁸ani nejde na periodickou doplnit, protože to by samozřejmě zbořilo snahu o studium omezeného Diracova hřebenu

chápaný jako závislé na parametru N , tj $F(\Lambda; N)$, pak jejich posloupnost představuje jednu z možných iterací k delta funkci (delta funkcím).

Jak $D(x)$, tak $\tilde{D}(x)$ mohou být chápaný jako rozložení jader v nějaké periodické struktuře – v difraktoskopii a teorii pevných látek je důležitou veličinou s fyzikální interpretací kvadrát Fourierova obrazu tohoto rozdělení [22]. Kvadrátem Fourierova obrazu (3.31) funkce (3.30) je funkce

$$F^2(\Lambda) = \frac{\sin^2 \left(N + \frac{1}{2} \right) a \Lambda}{\sin^2 \frac{1}{2} a \Lambda} \quad (3.33)$$

(fázový faktor se vyruší), která má s $F(\Lambda)$ podobné vlastnosti – je $\frac{2\pi}{a}$ -periodická, sudá a má globální maxima (rovná $(2N+1)^2$) v bodech reciproké množiny $M_a = \left\{ \frac{2\pi}{a} k \mid k \in \mathbb{Z} \right\}$; navíc poměrně blízko svého globálního maxima nabývá nulové hodnoty na obě strany, a to v bodech

$$\Lambda_{\pm} = \frac{2\pi}{a} \left(k \pm \frac{1}{2N+1} \right), k \in \mathbb{Z}. \quad (3.34)$$

Oblast mezi nimi lze považovat za pík, jehož pološířka se např. podle [22] definuje jako polovina "celošířky" vymezené uvedenými nulovými body, tedy

$$\Delta_{\frac{1}{2}} \Lambda = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{1}{2N+1}, \quad (3.35)$$

která zaujímá z celé periody (o délce $\frac{2\pi}{a}$) relativní díl rovný

$$\delta_{\frac{1}{2}} \Lambda = \frac{1}{2N+1}. \quad (3.36)$$

Tedy pík osamostatněného atomu zabírá celou periodu a např. pro $N = 2$ jednu pětinu, což odpovídá třeba tzv. difúzním difrakčním píkům pro atomy s pravidelným uspořádáním, volně se sdružující jen na krátkých vzdálenostech (třeba v plynech nebo kapalinách). Už pro relativně nízké N v řádu jednotek nebo desítek lze pík považovat za dobře lokalizovaný – tedy i opravdu velmi malý jednorozměrný krystal s pravidelným uspořádáním bude mít ve svém reciprokém prostoru jasnou ostrou periodickou strukturu okolo bodů reciproké množiny M_a .

3.2 a -periodické funkce dvou proměnných se čtvercovou symetrií

Reciproká množina pro periodické funkce více proměnných se obvykle nazývá reciproká mříž; uzly reciproké mříže mohou být v reciprokém prostoru vyjádřeny jako vektory $\vec{G}$.

Přechodem do vícerozměrného definičního oboru přibudou jevy, které pro funkce jedné proměnné nemají obdoby – reciproká mříž závisí na orientaci os v přímém prostoru, otáčí se spolu s rotací přímé mříže, funkce může být v různých řezech periodická jinak apod. –, a ty není potřeba zkoumat v plné obecnosti. Pro cluster rydbergovské hmoty je totiž vysloven předpoklad, že hustota elektronů v jeho rovině bude funkce hexagonálně symetrická a a -periodická (na určité oblasti). Pojmy jsou pro připomenutí vymezeny takto:

- Řezem funkce dvou proměnných je myšleno zúžení definičního oboru (např. roviny x - y) na přímku – řez je tedy v principu funkce jedné proměnné odečítané podél této přímky. Je-li řez funkce veden přímkou $g(x, y) = 0$, lze jej psát například jako

$$n(p) = n(x, y)|_{g(x, y)=0}, \quad (3.37)$$

kde p je takový parametr, aby byla dodržena škála původních proměnných, tj.

$$(\Delta p)^2 = (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 \quad (3.38)$$

- O funkci $f(x, y)$ dvou proměnných se prohlásí, že je hexagonálně symetrická s periodou $a > 0$, pokud je invariantní k pootočení o libovolný násobek úhlu $\frac{\pi}{3}$ okolo počátku $(0, 0)^T$ a pokud je a nejmenší mezi periodami všech řezů funkce přímkami procházejícími počátkem. Je přípustné, aby řez funkce byl a -periodický jen na určité oblasti definičního oboru, jsou-li splněna ostatní kritéria.
- Směry, ve kterých má funkce periodu právě a , se nazývají hlavní směry (hexagonální symetrie).

Cluster rydbergovské hmoty je dvourozměrné uspořádání atomů existující v třírozměrném prostoru. Lze očekávat, že jeho reciproká mříž bude v některém směru degenerovaná nebo triviální a pro začátek postačí se omezit na dvourozměrné struktury v rovině – přesah reciproké mříže do směru třetího bude doplněn později. Hexagonální symetrie clusteru je výjimečná v tom, že i když se nachází ve dvou rozměrech, jsou navzájem rovnocenné směry jeho symetrie tři, přičemž jen jeden z nich může být rovnoběžný s některou z kartézských os a hexagonální symetrie není invariantní k záměně $x \leftrightarrow y$ těchto proměnných. Pokud se třetí směr vyjádří jako závislý na dvou dalších, nemusí být vystiženy všechny vlastnosti hexagonálního periodického uspořádání.

Nechť je analogicky s hexagonální dána i třída a -periodických funkcí se čtvercovou symetrií. Čtvercová symetrie je oproti hexagonální výhodnější v tom, že směry souřadných os mohou být zvoleny ve směrech její symetrie. Potom ovšem každý řez přímkou $y = y_0 = \text{konst}$ musí být jednorozměrná a -periodická funkce podle (3.4) a podobně pro řezy přímkami $x = x_0 = \text{konst}$, ovšem v proměnné y . Druhý jmenovaný řez je $n(x, y)|_{x=x_0} = n(y; x_0)$. Pokud se pro všechny možné řezy $x = x_0$ vyčíslí hodnota v nějakém pevném Y , dá se takto zkonstruovat a -periodická funkce v proměnné x_0 : $\{(x_0, n(Y; x_0))\}$, zapsáno jako množina uspořádaných dvojic, nebo také

$$n(x_0; Y) = \sum_{l \in \mathbb{Z}} n_l(x_0) e^{i \frac{2\pi l Y}{a}}. \quad (3.39)$$

Zároveň ale tato funkce jde najít přirozeně rovnou řezem $y = Y$, tedy

$$n(x_0; Y) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} n_k(Y) e^{i \frac{2\pi k x_0}{a}}. \quad (3.40)$$

Aby si obě vyjádření byla rovna a aby bylo možno vyjádřit libovolnou⁹ funkci se čtvercovou symetrií, musí obecně

$$n(x, y) = \sum_{k, l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} (kx_0 + ly)}; \quad (3.41)$$

přeznačí-li se z parametrů zpět na proměnné, bude

$$n(x, y) = \sum_{k, l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} (kx + ly)} \quad (3.42)$$

Zavedou-li se jednotkové bezrozměrné vektory ve směrech os jako

$$\vec{e}_x = (1, 0)^T, \quad (3.43a)$$

$$\vec{e}_y = (0, 1)^T, \quad (3.43b)$$

lze konečně rozklad napsat v obecném tvaru

$$n(\vec{r}) = \sum_{k, l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} (k\vec{e}_x + l\vec{e}_y) \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{G} \in M_a} n_{\vec{G}} e^{i \vec{G} \cdot \vec{r}}, \quad (3.44)$$

o kterém lze u sudých funkcí (sudých v řezech podle souřadných os) očekávat, že bude mít tvar

⁹možnosti $n_{kl} = 1$ nebo $n_{kl} = n_k n_l = (n_k)^2 = (n_l)^2$, ke kterým mohou úvahy svádět, pokryjí jen speciální třídu funkcí

$$\begin{aligned}
n(x, y) &= \sum_{k, l \in \mathbb{Z}^2} \tilde{C}_{kl} \cos \frac{2\pi(kx + ly)}{a} = \\
&= \sum_{k, l \in \mathbb{Z}^2} \tilde{C}_{kl} \cos \frac{2\pi(k\vec{e}_x + l\vec{e}_y)\vec{r}}{a} = \sum_{\vec{G} \in M_a} \tilde{C}_{\vec{G}} \cos \vec{G}\vec{r}, \tag{3.45}
\end{aligned}$$

kde¹⁰

$$\begin{aligned}
\tilde{C}_{\vec{G}} = \tilde{C}_{kl} &= \left(\frac{2}{a}\right)^2 \int_0^{+\frac{a}{2}} \int_0^{+\frac{a}{2}} n(x', y') \cos \frac{2\pi(k\vec{e}_x + l\vec{e}_y)(x', y')^T}{a} dx' dy' = \\
&= \left(\frac{2}{a}\right)^2 \int_{\langle 0, \frac{a}{2} \rangle \times \langle 0, \frac{a}{2} \rangle} n(\vec{r}') \cos \vec{G}\vec{r}' d\vec{r}' \tag{3.46}
\end{aligned}$$

a kde byla zavedena množina

$$M_a = \left\{ \vec{G} = \frac{2\pi}{a} (k\vec{e}_x + l\vec{e}_y) \mid k, l \in \mathbb{Z}^2 \right\}, \tag{3.47}$$

o níž se lze domnívat, že bude reciprokou mříží pro a -periodické čtvercově symetrické funkce. Přísně vzato by se neměl prvek reciproké mříže psát pomocí vektorů přímé mříže, ale vektory $\vec{e}_x$ a $\vec{e}_y$ jsou bezrozměrné a každé $\vec{G}$ je s nimi dobře definované. Navíc je z tohoto vztahu i poznat těsná vazba mezi funkcí v přímém prostoru a reciprokou mříží – otočí-li se funkce v přímém prostoru, musí se pro její popis otočit i osy symetrie s příslušnými jednotkovými vektory a s nimi se otáčí i reciproká mříž. Skalární součin v exponentu navíc upomíná, že dvourozměrná funkce bude mít dvourozměrnou mříž. Stejně jako v jednom rozměru (pro funkci jedné proměnné) je M_a symetrická ($\vec{0} \in M_a \wedge \vec{G} \in M_a \Rightarrow -\vec{G} \in M_a$) a nezmění se při translaci funkce v přímém prostoru.

Stejně jako u funkce jedné proměnné je ve dvou rozměrech sčítání přes množinu M_a úplně uspokojivé jen tehdy, je-li tato množina určena nezávisle na číslech k a l . Opět lze vyjít z požadavku a -periodičnosti ve směrech os

$$\forall K, L \in \mathbb{Z}^2 : n(\vec{r}) = n(\vec{r} + a(K\vec{e}_x + L\vec{e}_y)), \tag{3.48}$$

což je prostým zobecněním podmínky (3.8) ve smyslu požadavků kladených na čtvercovou funkci. Dosazením do rozvoje výše vyplývá

¹⁰ uvedeno jen pro úplnost – jak bylo řečeno, tato kapitola se veličinami, které závisí na koeficientech rozvoje, téměř zabývat nebude

$$\begin{aligned}
\sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} (k\vec{e}_x + l\vec{e}_y) \vec{r}} &= \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} (k\vec{e}_x + l\vec{e}_y) (\vec{r} + a(K\vec{e}_x + L\vec{e}_y))} = \\
&= \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} (k\vec{e}_x + l\vec{e}_y) \vec{r}} \cdot e^{i \frac{2\pi}{a} (k\vec{e}_x + l\vec{e}_y) a(K\vec{e}_x + L\vec{e}_y)} \quad (3.49)
\end{aligned}$$

popř.

$$\begin{aligned}
\sum_{\vec{G} \in M_a} n_{\vec{G}} e^{i \vec{G} \vec{r}} &= \sum_{\vec{G} \in M_a} n_{\vec{G}} e^{i \vec{G} (\vec{r} + a(K\vec{e}_x + L\vec{e}_y))} = \\
&= \sum_{\vec{G} \in M_a} n_{\vec{G}} e^{i \vec{G} \vec{r}} \cdot e^{i \vec{G} (a(K\vec{e}_x + L\vec{e}_y))}. \quad (3.50)
\end{aligned}$$

Porovnáním sum na začátku a konci předchozí relace vyplývá

$$0 = \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} (k\vec{e}_x + l\vec{e}_y) \vec{r}} \cdot \left(e^{i 2\pi (kK + lL)} - 1 \right), \quad (3.51)$$

resp.

$$0 = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i \vec{G} \vec{r}} \cdot \left(e^{i \vec{G} (a(K\vec{e}_x + L\vec{e}_y))} - 1 \right), \quad (3.52)$$

kde bylo využito $\vec{e}_x \cdot \vec{e}_y = 1$. V analogii s (3.9) je opět závorka vytknuta zvlášť pro každé $\vec{G}$, a tedy každá zvlášť musí být nulová, což je ekvivalentní s podmínkou, aby argument exponenciely v závorce byl $i 2\pi$ -násobek libovolného celého čísla:

$$\vec{G} a (K\vec{e}_x + L\vec{e}_y) = 2\pi N, N \in \mathbb{Z} \Rightarrow \frac{a}{2\pi} \vec{G} (K\vec{e}_x + L\vec{e}_y) \in \mathbb{Z} \quad (3.53)$$

Pro splnění této podmínky lze předpokládat reciproký vektor ve formě

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (k\vec{e}_x + l\vec{e}_y), \quad (3.54)$$

jednak aby se vyrušil faktor $\frac{a}{2\pi}$ a jednak z výše uvedené úvahy, že i reciproký vektor je možné psát jako lineární kombinaci jednotkových bezrozměrných vektorů přímého prostoru; o k a l v tomto bodě celočíselnost ještě není předpokládána. Dosazením:

$$(k\vec{e}_x + l\vec{e}_y) (K\vec{e}_x + L\vec{e}_y) = kK + lL \in \mathbb{Z} \quad (3.55)$$

Aby pro libovolné pevně zvolené $K, L \in \mathbb{Z}^2$ byl i výraz $KK + LL$ celočíselný, je nutné, aby i k a l byla celá čísla¹¹. Podmínka periodicity tedy potvrzuje reciproku mříž

$$M_a = \left\{ \vec{G} = \frac{2\pi}{a} (k\vec{e}_x + l\vec{e}_y) \mid k, l \in \mathbb{Z}^2 \right\} \quad (3.56)$$

tak, jak bylo výše učiněno prostou substitucí pro čtvercově symetrickou funkci zkonstruovanou ze znalosti vlastností jednorozměrné funkce a z požadavků symetrie.

Konečně proto, že jednotkové bezrozměrné vektory $\vec{e}_x$ a $\vec{e}_y$ mají jednoduchou podobu po rozepsání po složkách, je možno každý bod reciproké mříže napsat jako

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (k, l)^T, k, l \in \mathbb{Z}^2. \quad (3.57)$$

3.3 Modelová a -periodická funkce dvou proměnných se čtvercovou symetrií

Zobecněním (3.19), tedy modelové funkce, pro čtvercově symetrickou mříž jakožto funkce, která má danou symetrii a periodicitu, která má globální maxima v bodech $a(K, L)^T$, $K, L \in \mathbb{Z}^2$ (tj. bodech přímé mříže) a hlavně která se dá úsporně napsat jen pomocí kosinů¹², je

$$n(x, y) = \left(\cos \frac{\pi x}{a} \right)^2 \left(\cos \frac{\pi y}{a} \right)^2. \quad (3.58)$$

Funkce je vykreslená na obrázku 3.2. Lze ji snadno upravit na

$$\begin{aligned} n(x, y) &= \left(\cos \frac{\pi x}{a} \cos \frac{\pi y}{a} \right)^2 = \left(\frac{1}{2} \left(\cos \frac{\pi(x+y)}{a} + \cos \frac{\pi(x-y)}{a} \right) \right)^2 = \\ &= \frac{1}{4} \left(\cos \frac{\pi(x+y)}{a} + \cos \frac{\pi(x-y)}{a} \right)^2 = \\ &= \frac{1}{4} \cos^2 \frac{\pi(x+y)}{a} + \frac{1}{2} \cos \frac{\pi(x+y)}{a} \cos \frac{\pi(x-y)}{a} + \frac{1}{4} \cos^2 \frac{\pi(x-y)}{a} = \\ &= \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi(x+y)}{a} \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \left(\cos \frac{2\pi x}{a} + \cos \frac{2\pi y}{a} \right) + \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi(x-y)}{a} \right) = \end{aligned}$$

¹¹podmínku lze splnit např. i tehdy, když by k a l náležely poločíselné množině $\{\dots, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}, \dots\}$, v takové množině ale např. chybí nula a člen n_{00} je pro rozvoj čtvercové periodické funkce určitě nutný

¹²jakožto zobecnění (3.15) pro sudé funkce jedné proměnné

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \cos \frac{2\pi x}{a} + \frac{1}{4} \cos \frac{2\pi y}{a} + \frac{1}{8} \cos \frac{2\pi(x+y)}{a} + \frac{1}{8} \cos \frac{2\pi(x-y)}{a} = \\
&= \frac{1}{4} + \frac{1}{8} \cos \frac{2\pi(-1)x}{a} + \frac{1}{8} \cos \frac{2\pi(+1)x}{a} + \frac{1}{8} \cos \frac{2\pi(-1)y}{a} + \frac{1}{8} \cos \frac{2\pi(+1)y}{a} + \\
&+ \frac{1}{16} \cos \frac{2\pi(x+y)}{a} + \frac{1}{16} \cos \frac{2\pi(-x-y)}{a} + \frac{1}{16} \cos \frac{2\pi(x-y)}{a} + \frac{1}{16} \cos \frac{2\pi(-x+y)}{a} = \\
&= \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} \cos \frac{2\pi(kx+ly)}{a}, n_{00} = \frac{1}{4}, n_{\pm 1,0} = n_{0,\pm 1} = \frac{1}{8}, n_{1,\pm 1} = n_{-1,\pm 1} = \frac{1}{16}, \quad (3.59)
\end{aligned}$$

což je ale Fourierův rozvoj této funkce. Jen devět koeficientů rozvoje je nenulových¹³. Alternativní výpočet koeficientů integrací podle Fourierovy teorie pro kontrolu tentokrát není třeba provádět – podstatné je, že bazické funkce, do kterých se dá a -periodická funkce rozložit, jsou typu $\cos \frac{2\pi(kx+ly)}{a} = \cos \vec{G} \cdot \vec{r}$, kde $\vec{G} \in M_a$ (3.47). Alternativně je možný rozklad do součinů

$$\cos \vec{k}G_1\vec{r} \cos \vec{l}G_2\vec{r}, \quad (3.60)$$

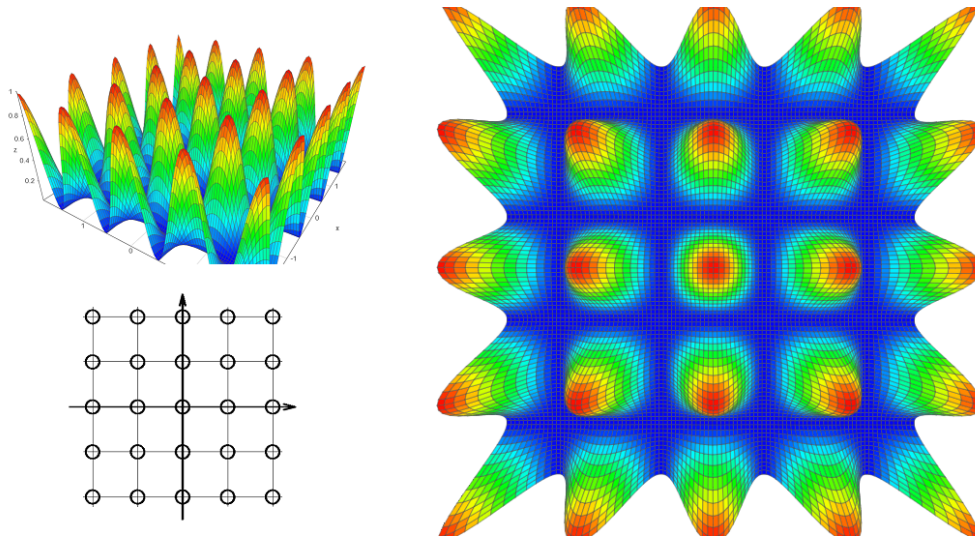
kde $\vec{G} = k\vec{G}_1 + l\vec{G}_2$, jak je vidět na třetím řádku v (3.59). Dvourozměrný nekonečný Diracův hřeben, ke kterému by tato funkce mohla být chápána jako iterace, by pak byl

$$\begin{aligned}
D(x, y) = D(\vec{r}) &= \sum_{K, L \in \mathbb{Z}^2} \delta(\vec{r} - a(K\vec{e}_x + L\vec{e}_y)) = \\
&= \sum_{k, l \in \mathbb{Z}^2} \left(\frac{1}{a}\right)^2 \cos \frac{2\pi(k\vec{e}_x + l\vec{e}_y)\vec{r}}{a} = \sum_{\vec{G} \in M_a} \left(\frac{1}{a}\right)^2 \cos \vec{G}\vec{r}, \quad (3.61)
\end{aligned}$$

neboť v analogii s (3.25) jsou $\left(\frac{1}{a}\right)^2$ Fourierovy koeficienty funkce $\delta(\vec{r})$.

Je-li známa jak čtvercová mříž $\{Ka\vec{e}_x + La\vec{e}_y | K, L \in \mathbb{Z}^2\}$, modelová funkce (3.58) a reciproká mříž čtvercové symetrie (3.56), nabízí se získat tyto pro hexagonální symetrii vhodnou transformací čtvercových vzorů. Vyjde-li se z požadavku, aby se správně transformovala přímá mříž, lze transformaci zvolit tak, aby na jedné z (hlavních) os hexagonální mříže (např. té ve směru osy x) zůstaly body nedotčeny a zbytek roviny byl "skloněn" o úhel $\frac{\pi}{3}$. Situaci ilustruje Obr. 3.3.

¹³u jiné funkce by takových samozřejmě mohlo být i nekonečně mnoho



Obr. 3.2: Funkce $n(x, y) = \left(\cos \frac{\pi x}{a}\right)^2 \left(\cos \frac{\pi y}{a}\right)^2$ jako modelová a -periodická funkce se čtvercovou symetrií. Vlevo nahoře je obecný perspektivní pohled na třírozměrné znázornění, vpravo perspektivní pohled svise dolů nad počátkem souřadnic a vlevo dole symbolické dvourozměrné vykreslení funkce pomocí jejích maxim – stejné by měl i čtvercový Diracův hřeben $D(\vec{r}) = \sum_{K, L \in \mathbb{Z}^2} \delta(\vec{r} - a(K\vec{e}_x + L\vec{e}_y))$. Všechna tři znázornění jsou na oblasti $\langle -2a, +2a \rangle \times \langle -2a, +2a \rangle$. Barevné obrázky byly vytvořeny v aplikaci Academo [23].

Dvojice vektorů ve čtvercové mříži (3.43a) a (3.43b) se v hexagonální zřejmě nahradí např. dvojicí

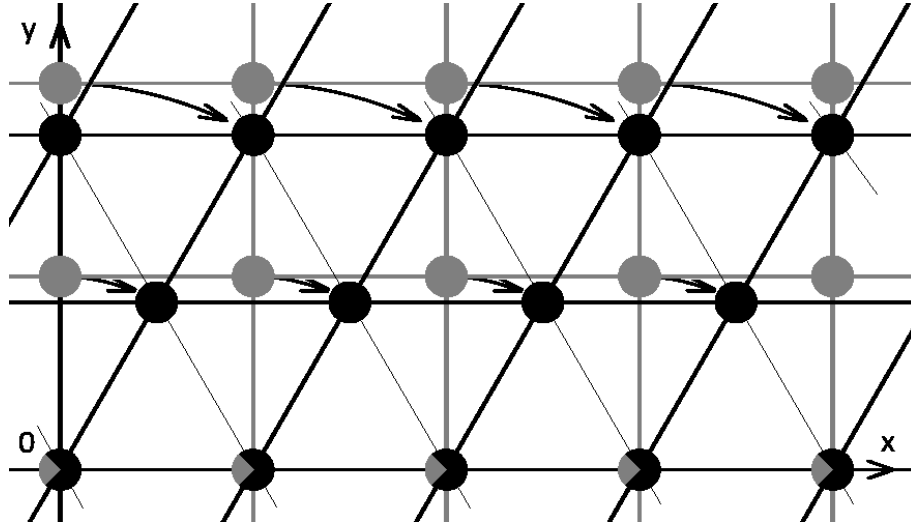
$$\vec{e}_K = (1, 0)^T \quad (3.62a)$$

$$\vec{e}_L = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)^T \quad (3.62b)$$

Je zřejmé, že se nejedná o rotaci¹⁴; na transformaci¹⁵ ale může být nahlíženo jako na "rotaci po částech", tedy ne okolo univerzálního počátku, ale parametricky závislého – bod $(x, y)^T$ se otočí o úhel $\frac{\pi}{6}$ (sic!) okolo bodu $(x, 0)^T$, zatímco bod $(x + \epsilon, y)^T$ se otočí o stejný úhel okolo bodu $(x + \epsilon, 0)^T$. V pevném souřadném systému změní každý z bodů roviny svoje souřadnice ze starých ("old", $(x_O, y_O)^T$) na nové ("new", $(x_N, y_N)^T$). Výše popsaná transformace je

¹⁴invariantní není jeden bod, ale přímka; navíc se mění úhly

¹⁵transformace je aktivní – souřadné osy se nemění



Obr. 3.3: Transformace (3.64) pro převod čtvercové přímé mříže na hexagonální. Vrcholy přímé mříže jsou plná kolečka – šedivá pro původní čtvercovou mříž, černá pro vznikající hexagonální a dvoubarevná pro ty na ose x , jež transformací zůstanou nedotčeny; šedivou a černou barvou jsou rovněž odlišeny spojnice vrcholů mříže ve čtvercové, resp. hexagonální mříže; osa x , na které se potkává vodorovný hlavní směr a první hlavní směr hexagonální mříže, je ponechána černá. Šipky naznačují vlastní transformaci, při které ze svislého hlavního směru vzniká druhý hlavní směr hexagonální mříže. Třetí hlavní směr hexagonální mříže, který v původní čtvercové před transformací nemá zvláštní význam, je vyznačen tence. Obrázek podle symboliky z Obr. 3.1 a Obr. 3.2 může znamenat i transformaci Diracova hřebenu ze čtvercového na hexagonální.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_N \\ y_N \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\pi}{6} & \sin \frac{\pi}{6} \\ -\sin \frac{\pi}{6} & \cos \frac{\pi}{6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ y_O \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_O \\ 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ y_O \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_O \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_O + \frac{1}{2}y_O \\ \frac{\sqrt{3}}{2}y_O \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.63)$$

která se snadno invertuje na

$$\begin{pmatrix} x_O \\ y_O \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_N - \frac{\sqrt{3}}{3}y_N \\ \frac{2\sqrt{3}}{3}y_N \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x - \frac{\sqrt{3}}{3}y \\ \frac{2\sqrt{3}}{3}y \end{pmatrix}. \quad (3.64)$$

Transformace (3.64) ze čtvercově symetrického a -periodického vzoru ale (možná překvapivě) obraz s hexagonální symetrií a periodou a nezaručí – neplatí implikace, že pokud je

$n(x, y)$ a -periodická funkce se čtvercovou symetrií, pak je $n\left(x - \frac{\sqrt{3}}{3}y, \frac{2\sqrt{3}}{3}y\right)^T$ v původních proměnných a -periodická funkce s hexagonální symetrií. Konkrétně Diracův hřeben a čtvercová přímá mříž se na přímou hexagonální mříž transformují správně, zatímco modelová funkce (3.58) po transformaci (3.64) definici hexagonálně symetrické funkce striktně nesplňuje. Obojímu se věnují následující odstavce.

3.4 Reciproká mříž pro a -periodické funkce s hexagonální symetrií – krystalografická definice

Jsou-li vektory přímé mříže v trojrozměrném prostoru $\vec{e}_1$, $\vec{e}_2$ a $\vec{e}_3$, pak se v krystalografii formálně definuje reciproká mříž jako celočíselná lineární kombinace následujících vektorů:

$$\vec{G}_1 \equiv \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{\vec{e}_2 \times \vec{e}_3}{\vec{e}_1 \cdot (\vec{e}_2 \times \vec{e}_3)}, \quad (3.65a)$$

$$\vec{G}_2 \equiv \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{\vec{e}_3 \times \vec{e}_1}{\vec{e}_2 \cdot (\vec{e}_3 \times \vec{e}_1)}, \quad (3.65b)$$

$$\vec{G}_3 \equiv \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{\vec{e}_1 \times \vec{e}_2}{\vec{e}_3 \cdot (\vec{e}_1 \times \vec{e}_2)}. \quad (3.65c)$$

Protože vzorce obsahují vektorové součiny, je nutno dvourozměrné vektory $\vec{e}_1 = \vec{e}_K = (1, 0)^T$ a $\vec{e}_2 = \vec{e}_L = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)^T$ rozšířit na trojrozměrné a doplnit o třetí vektor, a to např. následujícím trikem – nechť se hexagonální motiv v přímém prostoru opakuje v systému rovnoběžných rovin, navzájem od sebe vzdálených o $A \gg a$ (jednodušší je, když jsou roviny v kolmém směru navzájem v zákrytu, tj. nejedná se o "close-packed" uspořádání). Pak je trojice bezrozměrných vektorů přímé mříže $\vec{e}_1 = (1, 0, 0)^T$, $\vec{e}_2 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right)^T$ a $\vec{e}_3 = (0, 0, \frac{A}{a})^T$, odkud pro reciprokou mříž podle (3.65) vychází

$$\vec{G}_1 = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right)^T \times (0, 0, \frac{A}{a})^T}{(1, 0, 0) \cdot \left(\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right)^T \times (0, 0, \frac{A}{a})^T\right)} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0\right)^T, \quad (3.66a)$$

$$\vec{G}_2 = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{(0, 0, \frac{A}{a})^T \times (1, 0, 0)^T}{\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right)^T \cdot \left((0, 0, \frac{A}{a})^T \times (1, 0, 0)^T\right)} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} (0, 1, 0)^T, \quad (3.66b)$$

$$\vec{G}_3 = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{(1, 0, 0)^T \times \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right)^T}{(0, 0, \frac{A}{a})^T \cdot \left((1, 0, 0)^T \times \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right)^T\right)} = \frac{2\pi}{A} \cdot (0, 0, 1)^T. \quad (3.66c)$$

Osamostatní-li se nyní původní rovina oddálením pomocných rovin do nekonečna ($A \rightarrow +\infty$), bude třetí vektor triviální, stejně jako třetí složky prvních dvou a od třetího rozměru lze tedy upustit. Vyjde pak

$$\vec{G}_1 = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right)^T, \quad (3.67a)$$

$$\vec{G}_2 = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} (0, 1)^T, \quad (3.67b)$$

a reciproká mřížka ve dvou rozměrech je celočíselná lineární kombinace těchto dvou vektorů, tedy

$$M_a = \left\{ k\vec{G}_1 + l\vec{G}_2 | k, l \in \mathbb{Z}^2 \right\}. \quad (3.68)$$

Je vhodné upozornit na následující:

- Pořadí vektorů $\vec{e}_i$ v každém ze vzorců (3.65) je cyklické, nikoliv podle rostoucího indexu, jak často bývá zvykem. V důsledku toho svírají $\vec{G}_1$ a $\vec{G}_2$ úhel $\frac{2\pi}{3}$.
- Konstrukce rovin ve třetím směru v přímém prostoru a jejich oddálení do nekonečna limitním přechodem $A \rightarrow +\infty$ "zhustí" reciprokou mříž v odpovídajícím směru reciprokého prostoru do přímky. Trivialita reciproké mříže dvojrozměrného (dvojrozměrně uspořádaného) objektu v třírozměrném prostoru tedy bude taková, že ji tvoří přímky kolmé na rovinu pravidelného uspořádání a protínající ji v bodech, kde by byly její uzly ve dvou rozměrech.

Ekvivalentní (3.65) je následující metoda – platí, že jsou-li vektory přímé mříže v jednotkách a zapsány sloupcově do matice E , pak pro matici G sloupcových vektorů reciproké mříže v jednotkách $\frac{2\pi}{a}$ platí

$$G = E (E^T E)^{-1}. \quad (3.69)$$

Tuto metodu lze aplikovat na dvourozměrné i třírozměrné vektory (s případným trikem spočívajícím v $A \gg a$ stejně jako v předchozí metodě). Pro hexagonální symetrii je

$$E = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A}{a} \end{pmatrix}, \quad (3.70a)$$

$$E^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A}{a} \end{pmatrix}, \quad (3.70b)$$

takže

$$\begin{aligned} G &= E (E^T E)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A}{a} \end{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A}{a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A}{a} \end{pmatrix} \right)^{-1} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A}{a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (\frac{A}{a})^2 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A}{a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{4}{3} & -\frac{2}{3} & 0 \\ -\frac{2}{3} & \frac{4}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(\frac{A}{a})^2} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{2\sqrt{3}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{a}{A} \end{pmatrix} = \frac{2\sqrt{3}}{3} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \frac{a}{A} \end{pmatrix} \rightarrow \frac{2\sqrt{3}}{3} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.71) \end{aligned}$$

kde limita je pro $A \rightarrow +\infty$. Vektory¹⁶ reciproké mříže $\vec{G}_1 = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)^T$ a $\vec{G}_2 = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} \cdot (0, 1)^T$ jdou pak snadno vyextrahovat.

3.5 Reciproká mříž pro a -periodické funkce s hexagonální symetrií – konstrukce z požadavků symetrie

Pokud se zkonstruovaná transformace (3.64) ze čtvercové symetrie na hexagonální aplikuje na Fourierův rozvoj funkce, vychází

$$n(x, y) = \sum_{k, l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} \left(k \left(x - \frac{\sqrt{3}}{3} y \right) + l \left(\frac{2\sqrt{3}}{3} y \right) \right)} = \sum_{k, l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} \left(k x - k \frac{\sqrt{3}}{3} y + l \frac{2\sqrt{3}}{3} y \right)} =$$

¹⁶opět bezrozměrné a jednotkové

$$\begin{aligned}
&= \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} \left((k)x + (2l-k) \frac{\sqrt{3}}{3} y \right)} = \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} \left(k(1, -\frac{\sqrt{3}}{3}) \vec{r} + l(0, \frac{2\sqrt{3}}{3}) \vec{r} \right)} \\
&= \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} \left(k \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) \vec{r} + l \frac{2\sqrt{3}}{3} (0,1) \vec{r} \right)} = \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(k \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) + l(0,1) \right) \cdot \vec{r}} = \\
&= \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} n_{kl} e^{i(k\vec{G}_1 + l\vec{G}_2) \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{G} \in M_a} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} = n(\vec{r}), \tag{3.72}
\end{aligned}$$

kde ovšem množina M_a byla přejata z čtvercového vzoru. Není ale obtížné se (stejně jako u čtvercové symetrie) přesvědčit, že množinu

$$\begin{aligned}
M_a &= \left\{ \vec{G} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} (k\vec{e}_k + l\vec{e}_l) \mid k, l \in \mathbb{Z}^2 \right\} = \\
&= \left\{ \vec{G} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(k \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right)^T + l(0,1)^T \right) \mid k, l \in \mathbb{Z}^2 \right\} = \\
&= \left\{ \vec{G} = \frac{2\pi}{a} \cdot \left(k, \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(l - \frac{1}{2}k \right) \right)^T \mid k, l \in \mathbb{Z}^2 \right\}, \tag{3.73}
\end{aligned}$$

lze definovat nezávisle na $k, l \in \mathbb{Z}^2$ jako množina, která zaručí, že funkce

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G} \in M_a} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} \tag{3.74}$$

bude určitě a -periodická (v daných směrech). Ve směrech $\vec{e}_K = (1,0)^T$ a $\vec{e}_L = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)^T$ musí totiž pro každé $K, L \in \mathbb{Z}^2$ platit podmínky periodičnosti:

$$\begin{aligned}
&\sum_{\vec{G} \in M_a} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} = n(\vec{r}) = n(\vec{r} + a(K\vec{e}_K + L\vec{e}_L)) = \\
&= \sum_{\vec{G} \in M_a} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot (\vec{r} + a(K\vec{e}_K + L\vec{e}_L))} = \sum_{\vec{G} \in M_a} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} e^{ia\vec{G} \cdot (K\vec{e}_K + L\vec{e}_L)}, \tag{3.75}
\end{aligned}$$

odkud pro rozdíl koncových sum plyne

$$0 = \sum_{\vec{G} \in M_a} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} \left(e^{ia\vec{G} \cdot (K\vec{e}_K + L\vec{e}_L)} - 1 \right), \tag{3.76}$$

takže závorka vytknutá pro každé $\vec{G}$ musí být pokaždé nulová, tj. musí

$$\forall K, L \in \mathbb{Z}^2 : \frac{a}{2\pi} \vec{G} \cdot (K\vec{e}_K + L\vec{e}_L) \in \mathbb{Z}, \quad (3.77)$$

což po dosazení za jednotkové vektory dává

$$\frac{a}{2\pi} \vec{G} \cdot \left(K + \frac{1}{2}L, \frac{\sqrt{3}}{2}L \right)^T = \frac{a}{2\pi} \left(\left(K + \frac{1}{2}L \right) G_x + \left(\frac{\sqrt{3}}{2}L \right) G_y \right) \in \mathbb{Z}. \quad (3.78)$$

Vektor $\vec{G}$ lze předpokládat ve tvaru

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (\tilde{k}, \tilde{l})^T, \quad (3.79)$$

kde zlomkový předfaktor vyruší odpovídající zlomek v podmínce periodičnosti (3.78). O číslech $\tilde{k}$ a $\tilde{l}$ lze rovněž učinit předpoklady: $\tilde{l} = \frac{2}{\sqrt{3}}(l + l_0)$, $\tilde{k} = k$, $k, l \in \mathbb{Z}$, neboť takto se eliminuje i odmocnina, která je jinak překážkou celočíselnosti celého výrazu, a l_0 je zavedeno pro eliminaci neceločíselného členu z prvního součinu. Vychází

$$Kk + \frac{1}{2}Lk + Ll + Ll_0 \in \mathbb{Z}, \quad (3.80)$$

odkud snadno plyne, že $l_0 = -\frac{1}{2}k$ a podmínka periodičnosti má stejný tvar $Kk + Ll \in \mathbb{Z}$ jako u čtvercově symetrické funkce. Je tedy

$$\begin{aligned} \vec{G} &= \frac{2\pi}{a} \left(k, \frac{2}{\sqrt{3}} \left(l - \frac{1}{2}k \right) \right)^T = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k, l - \frac{1}{2}k \right)^T = \\ &= \frac{2\pi}{a} \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(k \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right)^T + l (0, 1)^T \right), \end{aligned} \quad (3.81)$$

což je množina stejných reciprokých vektorů jako zasubstituovaná výše po transformaci funkce se čtvercovou symetrií, a M_a je pak identické množině získané podle krystalografické definice.

Podmínku (3.77) neboli

$$(\forall K, L \in \mathbb{Z}^2)(\exists N \in \mathbb{Z}) : \frac{a}{2\pi} \vec{G} \cdot (K\vec{e}_K + L\vec{e}_L) = 2\pi N \quad (3.82)$$

lze chápat jako soustavu rovnic přímk¹⁷ v (reciproké) rovině G_x - G_y ¹⁸, které jdou rozdělit do navzájem rovnoběžných tříd podle dvojic parametrů K a L – nechť jsou nazvány K - L

¹⁷obecněji nadrovin

¹⁸např. ve vztahu (3.28) se striktně rozlišuje proměnná reciprokého prostotu Λ a její podmnožina M_a bodů reciproké mříže, zde je ponecháno jen jedno značení

třídy; v rámci dané K - L třídy jsou přímky indexovány číslem N . Reciprokou množinou je pak v tomto výkladu taková množina bodů, že každým z nich prochází z každé K - L třídy alespoň jedna přímka. Pro $L \neq 0$ je směrnicový tvar těchto přímek

$$G_y = -\frac{2\sqrt{3}}{3} \cdot \left(\frac{K}{L} + \frac{1}{2} \right) G_x + \frac{2\sqrt{3}}{3} \cdot \frac{2\pi}{La} N, \quad (3.83)$$

zatímco pro $L = 0, K \neq 0$ jsou přímky dány jako

$$G_x = \frac{2\pi}{Ka} N, N \in \mathbb{Z}, \quad (3.84)$$

tedy soustavu přímky rovnoběžné se (svislou) osou G_y a navzájem vzdálených o $\frac{2\pi}{Ka}$; případ $K = L = 0$ je degenerovaný, vyhoví mu každý bod roviny. Protože každá K - L třída prochází bodem $(0,0)^T$ reciprokého prostoru s parametrem $N = 0$ a k ní nejbližší přímky mají parametr $N = \pm 1$ (kromě degenerovaného případu zmíněného výše), je podle vztahu pro vzdálenost mezi bodem a přímkou vzdálenost mezi sousedními přímkami v K - L třídě rovna

$$\frac{\frac{2\pi}{a}}{\sqrt{K^2 + KL + L^2}}; \quad (3.85)$$

výraz pod odmocninou je vždy nezáporný.

Ať už je reciproká mříž nalezena z definice, nebo zkonstruována přímo z požadavků kladených na funkce, které s ní souvisí přes Fourierův rozvoj, vždy vychází, že je co do hlavních směrů symetrie oproti přímé pootočená o $\frac{\pi}{2}$. Přirozeně je toto natočení nejsugestivnější v geometrické metodě.

Reciprokou množinu by bylo možné určit i jako Fourierův obraz mříže přímé, tj. nekonečného Diracova hřebenu, v této práci bude tato operace provedena jen pro konečný Diracův hřeben reprezentující právě cluster rydbergovské hmoty.

Lze uzavřít, že transformace (3.64) vede ke správné reciproké množině a -periodických funkcí s hexagonální symetrií.

3.6 Modelová funkce pro a -periodické funkce hexagonální symetrie

Transformace (3.72) čtvercově symetrické funkce na hexagonálně symetrickou byla provedena na exponenciálním rozkladu a -periodické funkce. V souladu s rozбором sudých funkcí jedné proměnné a v inspiraci s modelovou funkcí (3.19) lze ale očekávat, že

čtvercově symetrické funkce bude možné místo do exponenciál rozložit "kosinovo-kosinově". Zobecněním (3.15a) do dvou rozměrů a pro danou symetrii by mohlo být

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G} \in M_a} \tilde{C}_{\vec{G}} \cos \vec{G} \vec{r} = \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} \tilde{C}_{k,l} \cos \left(k \vec{G}_1 + l \vec{G}_2 \right) \vec{r}, \quad (3.86)$$

zatímco ze čtvercové modelové funkce (3.58) a jejího rozkladu lze očekávat rozklad typu

$$n(\vec{r}) = \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} \tilde{C}_{k,l} \cos k \vec{G}_1 \vec{r} \cos l \vec{G}_2 \vec{r}. \quad (3.87)$$

Je zajímavé, že díky součtovým vzorcům (3.16a) a (3.16b) platí mezi oběma vyjádřeními rovnost:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{G} \in M_a} \tilde{C}_{\vec{G}} \cos \vec{G} \vec{r} &= \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} \tilde{C}_{kl} \cos \frac{2\pi (kx + ly)}{a} = 2 \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} \frac{\tilde{C}_{kl}}{2} \cos \frac{2\pi (kx + ly)}{a} = \\ &= \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} \frac{\tilde{C}_{kl}}{2} \cos \frac{2\pi (kx + ly)}{a} + \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} \frac{\tilde{C}_{kl}}{2} \cos \frac{2\pi (kx - ly)}{a} = \\ &= \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} \tilde{C}_{kl} \cdot \frac{1}{2} \left(\cos \frac{2\pi (kx + ly)}{a} + \cos \frac{2\pi (kx - ly)}{a} \right) = \\ &= \sum_{k,l \in \mathbb{Z}^2} \tilde{C}_{kl} \cos \frac{2\pi kx}{a} \cos \frac{2\pi ly}{a} = \sum_{\vec{G} (=k\vec{G}_1+l\vec{G}_2) \in M_a} \tilde{C}_{\vec{G}} \cos k \vec{G}_1 \vec{r} \cos l \vec{G}_2 \vec{r} \end{aligned} \quad (3.88)$$

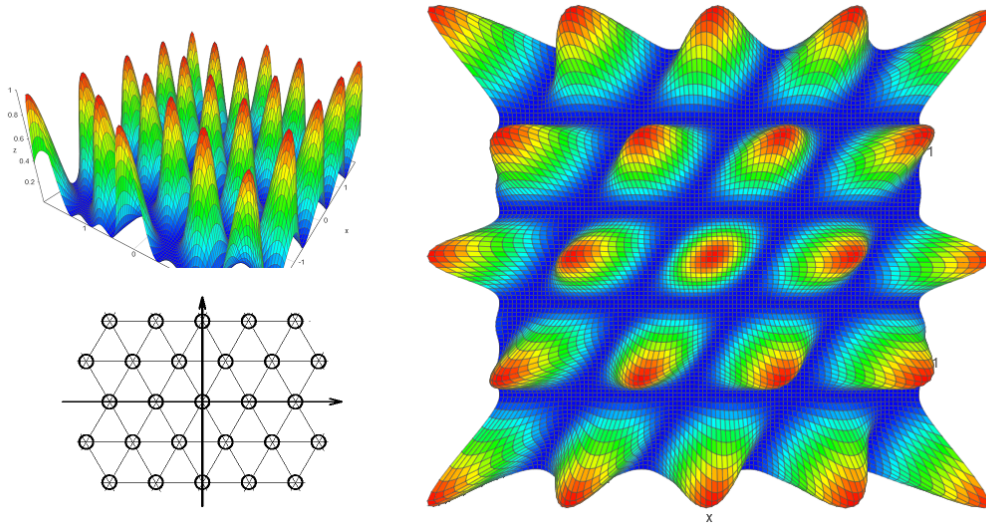
Toto lze algebraicky považovat za analog vztahu $e^{i \frac{2\pi (k\vec{e}_x + l\vec{e}_y)}{a} \vec{r}} = e^{i \frac{2\pi kx}{a}} e^{i \frac{2\pi ly}{a}}$. V úpravách byla využita souměrnost množiny $\mathbb{Z}^2$ vůči změně znaménka u jedné ze složek a také souměrnosti koeficientů: $\tilde{C}_{kl} = \tilde{C}_{k,-l}$.

Pokud se aplikuje transformace (3.64) na modelovou funkci (3.58) čtvercové symetrie, vychází

$$\begin{aligned} n(x, y) &= \left(\cos \frac{\pi \left(x - \frac{\sqrt{3}}{3} y \right)}{a} \right)^2 \left(\cos \frac{\pi \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} y}{a} \right)^2 = \\ &= \left(\cos \frac{\pi \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) (x, y)^T}{a} \right)^2 \left(\cos \frac{\pi \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} (0, 1) (x, y)^T}{a} \right)^2 = \end{aligned}$$

$$= \left(\cos \frac{\vec{G}_1}{2} \cdot \vec{r} \right)^2 \left(\cos \frac{\vec{G}_2}{2} \cdot \vec{r} \right)^2, \quad (3.89)$$

kde vektory $\vec{G}_1$ a $\vec{G}_2$ byly převzaty z reciproké množiny M_a ¹⁹. Už vizuálně zaujme, že výraz explicitně neobsahuje třetí význačný směr hexagonální symetrie – např. $\vec{G} = -\vec{G}_1 - \vec{G}_2$ – a tento varovný dojem potvrzuje i analýza získané funkce – je sice a -periodická ve všech hlavních směrech, ale ne ve všech stejně. Funkce je ilustrována na Obr. 3.4.



Obr. 3.4: Funkce $n(\vec{r}) = \left(\cos \frac{\vec{G}_1}{2} \cdot \vec{r} \right)^2 \left(\cos \frac{\vec{G}_2}{2} \cdot \vec{r} \right)^2$. Je daná stejnou transformací (3.64), která z čtvercové mříže (nebo Diracova hřebenu) vytvoří hexagonální, ale výsledkem není funkce hexagonálně symetrická, protože kvůli zjevnému "zkosení" není invariantní k pootočení o úhel $\frac{\pi}{3}$. Vlevo nahoře je obecný perspektivní pohled, po směru hodinových ručiček pak náhled nad počátkem a symbolické znázornění pomocí poloh maxim/uzlů Diracova hřebenu s hexagonální symetrií. Barevné grafy jsou nad oblastí $\langle -2a, +2a \rangle \times \langle -2a, +2a \rangle$ definičního oboru a byly vytvořeny v aplikaci Academo [23].

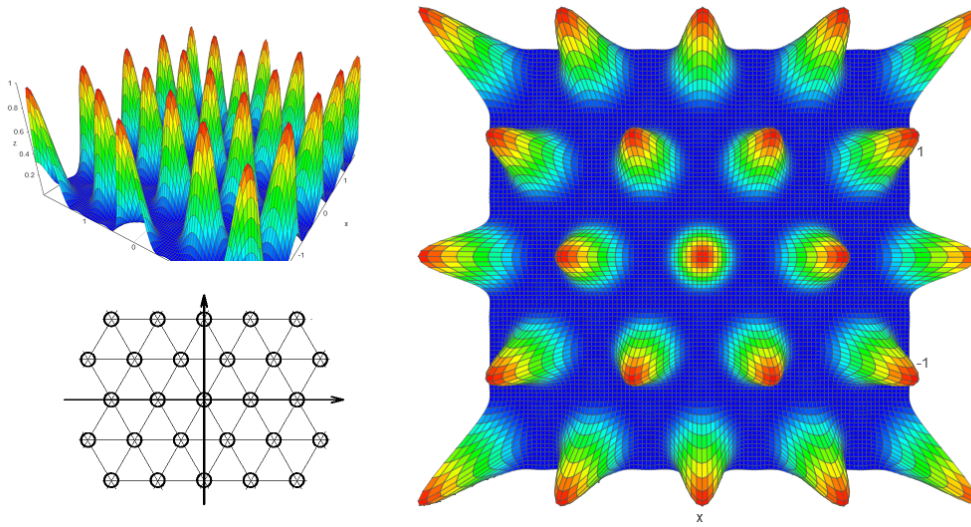
Tato funkce tedy není uspokojivým modelem, protože definici a -periodické hexagonálně symetrické funkce nevyhovuje (není invariantní vůči rotaci o úhel $\frac{\pi}{3}$). Že transformace právě takto dopadne, mohlo být zřejmé už ze zamyšlení nad čtvercově symetrickým vzorem transformace, který by musel mít velmi speciální průběh, jednak těžko odhad-

¹⁹modelová funkce je podle vzoru (3.19) natolik jednoduchá, že se zde samozřejmě přes M_a nesčítá

nutelný a jednak určitě nesymetrický vůči otočení o $\frac{\pi}{2}$, na rozdíl od (3.58). Zkosení funkce je do třetího, explicitně nezahrnutého směru, nabízí se tedy funkci opravit na

$$n(\vec{r}) = \left(\cos \frac{\vec{G}_1}{2} \cdot \vec{r} \right)^2 \left(\cos \frac{\vec{G}_2}{2} \cdot \vec{r} \right)^2 \left(\cos \frac{-\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \cdot \vec{r} \right)^2, \quad (3.90)$$

tedy funkci zesymetrizovat vůči všem těmto třem směrům. Výsledek (na Obr. 3.5) vizuálně uspokojivý je; že se jedná o a -periodickou hexagonálně symetrickou funkci, ukáže analýza v následující sekci.



Obr. 3.5: Funkce $n(\vec{r}) = \left(\cos \frac{\vec{G}_1}{2} \cdot \vec{r} \right)^2 \left(\cos \frac{\vec{G}_2}{2} \cdot \vec{r} \right)^2 \left(\cos \frac{-\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \cdot \vec{r} \right)^2$ jakožto plná symetrizace funkce (3.89) vůči směrům hexagonální symetrie; definici a -periodické hexagonální symetrie vyhovuje, o čemž se dá přesvědčit i výpočtem. Vlevo nahoře je obecný perspektivní pohled, po směru hodinových ručiček pak náhled nad počátkem a symbolické znázornění pomocí poloh maxim/uzlů Diracova hřebenu s hexagonální symetrií. Barevné grafy jsou nad oblastí $\langle -2a, +2a \rangle \times \langle -2a, +2a \rangle$ definičního oboru a byly vytvořeny v aplikaci Academo [23].

3.7 Fourierův rozklad modelové funkce

Je důležité, že byly argumenty zvoleny tak, aby jejich součet dal nulu – to záhy umožní funkci rozložit do součinu tří kosinů $\cos \frac{\vec{G}_1}{2} \cdot \vec{r} \cos \frac{\vec{G}_2}{2} \cdot \vec{r} \cos \frac{-\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \cdot \vec{r}$ a zároveň zdůvodní, proč rozklad tohoto typu v případě exponenciál nevede ke správnému výsledku, protože

$e^{i\frac{\vec{G}_1}{2}\vec{r}}e^{i\frac{\vec{G}_2}{2}\vec{r}}e^{i\frac{-\vec{G}_1-\vec{G}_2}{2}\vec{r}} = e^0 = 1$. Rovnost mezi (3.86) a (3.87) platí pro součin dvou kosinů, zatímco $\Pi_j e^{i\omega_j} = e^{i\sum_j \omega_j}$ pro libovolný počet exponenciál. Součin tří kosinů obecně jednoduchý rozklad mít nemusí, v tomto případě se ale vyplatí výše uvedená volba – platí totiž identita

$$4 \cos \frac{A+B}{2} \cos \frac{B+C}{2} \cos \frac{C+A}{2} = \cos A + \cos B + \cos C + \cos(A+B+C). \quad (3.91)$$

Protože lze volit A, B, C ve smyslu směrů hexagonální symetrie tak, aby $A+B+C=0$ (např. zmíněná trojice $\frac{\vec{G}_1}{2}\vec{r}$, $\frac{\vec{G}_2}{2}\vec{r}$ a $\frac{-\vec{G}_1-\vec{G}_2}{2}\vec{r}$), je uvedená identita pojátkem mezi součtem a součinem tří kosinů, což je vzhledem k jinak obecně platným (3.16a) a (3.16b) velmi neobvyklé a jedná se o speciální vlastnost právě hexagonální symetrie.

Trojice $\frac{\vec{G}_1}{2}\vec{r}$, $\frac{\vec{G}_2}{2}\vec{r}$ a $\frac{-\vec{G}_1-\vec{G}_2}{2}\vec{r}$ není spojená pouze tím, že dá v součtu nulu, ale také tím, že první složky skalárních součinů v argumentech jsou vůči sobě pootočený o $\frac{2\pi}{3}$. Pokud se označí $R_{(3)}$ matice (aktivní) rotace o úhel $\frac{2\pi}{3}$ v rovině např. proti směru hodinových ručiček²⁰, bude

$$\frac{\vec{G}_1}{2} = R_{(3)} \left(\frac{-\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \right) = R_{(3)}^2 \left(\frac{\vec{G}_2}{2} \right) = R_{(3)}^2 \left(\frac{\vec{G}_1}{2} \right) \quad (3.92)$$

a také

$$\begin{aligned} \cos \left(\frac{\vec{G}_1}{2}\vec{r} \right) \cos \left(\frac{\vec{G}_2}{2}\vec{r} \right) \cos \left(\frac{-\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2}\vec{r} \right) &= \\ &= \cos \left(\frac{\vec{G}_1}{2}\vec{r} \right) \cos R_{(3)} \left(\frac{\vec{G}_1}{2}\vec{r} \right) \cos R_{(3)}^2 \left(\frac{\vec{G}_1}{2}\vec{r} \right). \end{aligned} \quad (3.93)$$

Pro druhou uvedenou rovnost je vhodné zavést zkrácený zápis: Pro každou trojici vektorů $\vec{G}_A, \vec{G}_B$ a $\vec{G}_C$ splňující $\vec{G}_A + \vec{G}_B + \vec{G}_C = 0$ a $\vec{G}_A = R_{(3)}\vec{G}_C = R_{(3)}^2\vec{G}_B = R_{(3)}^2\vec{G}_A$ nechť

$$\begin{aligned} \cos_{(3)}(\vec{r}; \vec{G}_A) &\equiv \cos(\vec{G}_A \cdot \vec{r}) \cos(\vec{G}_B \cdot \vec{r}) \cos(\vec{G}_C \cdot \vec{r}) = \\ &= \cos(\vec{G}_A \cdot \vec{r}) \cos(R_{(3)}(\vec{G}_A) \cdot \vec{r}) \cos(R_{(3)}^2(\vec{G}_A) \cdot \vec{r}). \end{aligned} \quad (3.94)$$

²⁰pak konkrétně bude $R_{(3)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ +\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

Protože je $\cos(-\vec{G}_A \cdot \vec{r}) = \cos(\vec{G}_A \cdot \vec{r})$, je z druhého řádku (3.94) zřejmé, že součin tří kosinů za podmínek předcházející definici je vždy možné zkrátit na $\cos_{(3)}(\vec{r}; \vec{G}_A)$ tak, že je $\vec{G}_A$ vždy z pevně daného (ale libovolného) sextantu roviny (popř. jeho hranice)²¹. Tento sextant lze definovat jako jakousi šestinu reciproké mříže např. takto:

$$M_a^{(6)} \equiv \{\vec{0}\} \cup \left\{ \vec{G} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(k \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right)^T + l (0, 1)^T \right) \mid k > 0, l \leq 0 \right\} \quad (3.95)$$

Tím je (až na $\vec{G} = 0$) z roviny mříže rozdělené podle směrů $\vec{G}_1$, $\vec{G}_2$ a $-\vec{G}_1 - \vec{G}_2$ vyňata právě šestina (jen s jednou hranicí).

Možnost zavedení značení $\cos_{(3)}(\vec{r}; \vec{G})$ a $M_a^{(6)}$ společně s algebraickým tvarem modelové funkce (3.90) vede k vyslovení následující hypotézy²²:

- Každá a -periodická funkce s hexagonální symetrií lze rozložit do Fourierovy řady jako

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G} \in M_a^{(6)}} \tilde{C}_{\vec{G}} \cos_{(3)}\left(\vec{r}; \frac{\vec{G}}{2}\right) \quad (3.96)$$

Tato hypotéza v této práci nebude dokazována, ale její platnost bude demonstrována přímým odvozením na dvojici funkcí – na modelové funkci (3.90) a na konečném Diracově hřebenu s hexagonální symetrií.

Rozklad modelové funkce (3.90) s pomocí identity (3.91) a vzorců (3.16) není složitý:

²¹až na $\vec{G}_A = 0$, který se buď může vyčlenit zvlášť mimo dělení do sextantů nebo naopak zařadit do všech

²²hypotéza se zabývá jen algebraickým tvarem rozkladu, nikoliv například podmínkami konvergence

$$\begin{aligned}
n(\vec{r}) &= \left(\cos \frac{\vec{G}_1 \cdot \vec{r}}{2} \right)^2 \left(\cos \frac{\vec{G}_2 \cdot \vec{r}}{2} \right)^2 \left(\cos \frac{(-\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \cdot \vec{r}}{2} \right)^2 = \\
&= \frac{1}{2} \left(1 + \cos \vec{G}_1 \cdot \vec{r} \right) \frac{1}{2} \left(1 + \cos \vec{G}_2 \cdot \vec{r} \right) \frac{1}{2} \left(1 + \cos (-\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \cdot \vec{r} \right) = \\
&= \frac{1}{8} \left[1 + \cos \vec{G}_1 \cdot \vec{r} \cos \vec{G}_2 \cdot \vec{r} \cos (-\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \cdot \vec{r} \right. \\
&\quad \left. + \cos \vec{G}_1 \cdot \vec{r} + \cos \vec{G}_2 \cdot \vec{r} + \cos (-\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \cdot \vec{r} + \right. \\
&\quad \left. + \cos \vec{G}_1 \cdot \vec{r} \cos \vec{G}_2 \cdot \vec{r} + \cos \vec{G}_1 \cdot \vec{r} \cos (-\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \cdot \vec{r} + \cos \vec{G}_2 \cdot \vec{r} \cos (-\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \cdot \vec{r} \right] = \\
&= \frac{1}{8} \left[1 + \cos \vec{G}_1 \cdot \vec{r} \cos \vec{G}_2 \cdot \vec{r} \cos (-\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \cdot \vec{r} \right. \\
&\quad \left. + 4 \cos \frac{\vec{G}_1}{2} \vec{r} \cos \frac{\vec{G}_2}{2} \vec{r} \cos \frac{-\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \vec{r} - 1 + \right. \\
&\quad \left. + \cos \vec{G}_1 \cdot \vec{r} \cos \vec{G}_2 \cdot \vec{r} + \cos \vec{G}_1 \cdot \vec{r} \cos (-\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \cdot \vec{r} + \cos \vec{G}_2 \cdot \vec{r} \cos (-\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \cdot \vec{r} \right] = \\
&= \frac{1}{8} \left[\cos_{(3)} \left(\vec{r}; 2 \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + 4 \cos_{(3)} \left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + \frac{1}{2} \left(\cos (\vec{G}_1 + \vec{G}_2) \vec{r} + \cos (\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \vec{r} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\cos \vec{G}_2 \vec{r} + \cos (2\vec{G}_1 + \vec{G}_2) \vec{r} \right) + \frac{1}{2} \left(\cos \vec{G}_1 \vec{r} + \cos (\vec{G}_1 + 2\vec{G}_2) \vec{r} \right) \right] = \\
&= \frac{1}{8} \left[\cos_{(3)} \left(\vec{r}; 2 \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + 4 \cos_{(3)} \left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\cos \vec{G}_1 \vec{r} + \cos \vec{G}_2 \vec{r} + \cos (-\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \vec{r} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\cos (\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \vec{r} + \cos (\vec{G}_1 + 2\vec{G}_2) \vec{r} + \cos (-2\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \vec{r} \right) \right] =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{8} \left[\cos_{(3)} \left(\vec{r}; 2 \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + 4 \cos_{(3)} \left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \cdot 4 \cos \frac{\vec{G}_1}{2} \vec{r} \cos \frac{\vec{G}_2}{2} \vec{r} \cos \frac{-\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \vec{r} - \frac{1}{2} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \cdot 4 \cos \frac{\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \vec{r} \cos \frac{\vec{G}_1 + 2\vec{G}_2}{2} \vec{r} \cos \frac{-2\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \vec{r} - \frac{1}{2} \right] = \\
&= \frac{1}{8} \left[-1 + \cos_{(3)} \left(\vec{r}; 2 \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + 4 \cos_{(3)} \left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + \right. \\
&\quad \left. + 2 \cos_{(3)} \left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + 2 \cos_{(3)} \left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \right) \right] = \\
&= \frac{1}{8} \left[-1 + \cos_{(3)} \left(\vec{r}; 2 \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + 6 \cos_{(3)} \left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + 2 \cos_{(3)} \left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \right) \right] = \\
&= -\frac{1}{8} + \frac{3}{4} \cos_{(3)} \left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + \frac{1}{8} \cos_{(3)} \left(\vec{r}; 2 \frac{\vec{G}_1}{2} \right) + \frac{1}{4} \cos_{(3)} \left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \right) \quad (3.97),
\end{aligned}$$

neboli

$$\begin{aligned}
n(\vec{r}) &= \sum_{\vec{G} \in M_a^{(6)}} C_{\vec{G}=k\vec{G}_1+l\vec{G}_2} \cos_{(3)} \left(\vec{r}; \frac{\vec{G}}{2} \right), \\
C_{0 \cdot \vec{G}_1 + 0 \cdot \vec{G}_2} &= -\frac{1}{8}, C_{1 \cdot \vec{G}_1 + 0 \cdot \vec{G}_2} = \frac{3}{4}, \\
C_{2 \cdot \vec{G}_1 + 0 \cdot \vec{G}_2} &= \frac{1}{8}, C_{1 \cdot \vec{G}_1 + (-1) \cdot \vec{G}_2} = \frac{1}{4}; \text{ jinak } 0 \quad (3.98)
\end{aligned}$$

Ještě by mělo být ověřeno, že je (3.90) opravdu a -periodická hexagonálně symetrická funkce. Řez funkce přímkou $y = -\sqrt{3}x$, tj. podél jednoho ze směrů symetrie, je funkce jedné proměnné p , dosadí-li se $x = \frac{1}{2}p$, $y = -\frac{\sqrt{3}}{2}p$, $\vec{G}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right)^T$ a $\vec{G}_2 = (0, 1)^T$:

$$\begin{aligned}
n(p) &= n(x, y)_{y=\sqrt{3}x} = \left(\cos \frac{\pi}{a} p \right)^2 \left(\cos \frac{\pi}{a} (-p) \right)^2 (\cos 0)^2 = \\
&= \left(\cos \frac{\pi}{a} p \right)^4 = \frac{3}{8} + \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi p}{a} + \frac{1}{8} \cos \frac{4\pi p}{a}.
\end{aligned} \tag{3.99}$$

To a -periodická (a sudá) funkce jedné proměnné rozhodně je. Invariantnost vůči rotaci o $\frac{\pi}{3}$ je zřejmá z konstrukce $\cos_{(3)}(\vec{r}; \vec{G})$ pomocí matice R a z toho, že je funkce kosinus sudá.

3.8 Velikost clusteru a počet uzlů v něm

V kapitole věnující se řešerši o rydbergovské hmotě byla jmenována hlavní posloupnost magických čísel, tj. počtu uzlů v clusterech tvaru pravidelných a úplných šestiúhelníků, jako 7, 19, 37, 61, 91, čemuž odpovídá formule

$$\#_V = 3V^2 + 3V + 1; \tag{3.100}$$

ta bude nyní odvozena několika způsoby. Symbol V parametrizuje velikost clusteru podle počtu šestiúhelníků obklopujících centrální uzel – počet uzlů na přímce podél jednoho z hlavních směrů symetrie pak bude $2V + 1$, maximální šířka $2Va$ a velikost hrany Va .

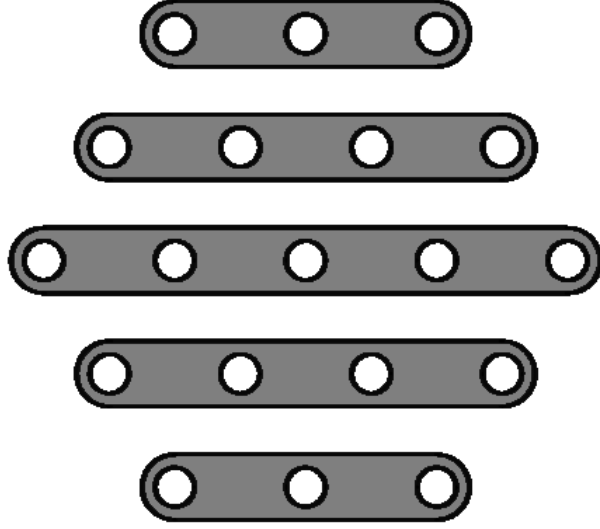
- Počet uzlů v clusteru lze určit například sčítáním přímo přes šestiúhelníky, tj. k jedinému středovému uzlu se přičítají vždy násobky šesti. Je tedy:

$$\#_V = 1 + \sum_{v=1}^V 6v = 1 + 6 \sum_{v=1}^V v = 1 + 6 \cdot \frac{1}{2} V(1 + V) = 3V^2 + 3V + 1 \tag{3.101}$$

- Sčítat lze ale i "po řádcích", tj. podél jednoho z hlavních směrů – uprostřed clusteru je řada $2V + 1$ uzlů a na obě strany jich pak aritmetickou řadou ubývá až po $V + 1$. Vychází:

$$\#_V = 2V + 1 + 2 \sum_{v=V+1}^{2V} v \left(= 2 \sum_{v=V+1}^{2V+1} v - (2V + 1) \right) = 3V^2 + 3V + 1 \tag{3.102}$$

Uskupení sčítanců je znázorněno na Obr. 3.6.



Obr. 3.6: Symbolické znázornění sčítanců při sčítání uzlů "po řádcích". Největší (prostřední) skupina má $2V + 1$ uzlů, dvě nejmenší (krajní) pak $V + 1$.

- Při sčítání "po sloupcích" (kolmo vůči jednomu z hlavních směrů) stačí sečíst počty uzlů ve dvou čtvercových a dvou trojúhelníkovitých uspořádáních:

$$\#_V = (V + 1)^2 + V^2 + 2 \sum_{v=1}^V v = 3V^2 + 3V + 1 \quad (3.103)$$

- A konečně lze vysčítávat přes K a L , tedy indexy bodů mřížky přímého prostoru. Potíží je, že meze nejsou konstantní (jak by tomu bylo například u čtvercové mřížky), protože se okraj clusteru lomí a jeho šest vrcholů protínají směry $K = 0$ a $L = 0$ jen na čtyřech místech. Vystihnout toto matematicky však není obtížné, použijí-li se vhodné lomené čáry – nechť je souřadnice K nezávislá, tj. probíhá množinu $\{-V, \dots, +V\}$ a dolní a horní hranici je označena jako L_{down} a L_{up} . Hranice mají v řeči K a L jednoduché matematické vyjádření pomocí absultních hodnot:

$$L_{\text{up}} = -\frac{1}{2}K + V - \left\lfloor \frac{1}{2}K \right\rfloor \quad (3.104a)$$

$$L_{\text{down}} = -\frac{1}{2}K - V + \left\lceil \frac{1}{2}K \right\rceil \quad (3.104b)$$

Díky tomu konečně

$$\begin{aligned}
\#_V &= \sum_{K=-V}^{+V} \sum_{L=-\frac{1}{2}K-V+|\frac{1}{2}K|}^{-\frac{1}{2}K+V-|\frac{1}{2}K|} 1 = \sum_{K=-V}^{+V} (2V+1-|K|) = \\
&= \sum_{K=-V}^{-1} (2V+1+K) + \sum_{K=0}^{+V} (2V+1-K) = \\
&= (2V+1)V + \frac{1}{2}V(-V-1) + (2V+1)(V+1) - \frac{1}{2}V(V+1) = \\
&= (2V+1)^2 - 2\frac{1}{2}V(V+1) = 4V^2 + 4V + 1 - V^2 - V = 3V^2 + 3V + 1, \quad (3.105)
\end{aligned}$$

čímž je výsledek opět potvrzen. Přísně vzato se jedná o sčítání "po řádcích" jiným způsobem, konkrétně pomocí povolených hodnot K a L pro dané V .

3.9 Indexování (nad)rovin

V rozkladu a -periodických funkcí hexagonální symetrie se vždy vyskytují $\vec{G}$ a $\vec{r}$ ve skalárních součinech, jsou tedy záměnné; a stejně jako k danému bodu přímé mříže byla nalezena třída přímek/nadrovin v reciprokém prostoru (3.82), dá se pro každý bod množiny M_a najít třída navzájem rovnoběžných přímek/nadrovin v přímém prostoru. Protože z podmínek periodicity (3.75) musí

$$\frac{1}{a} \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{3}k, l - \frac{1}{2}k \right) \cdot (x, y)^T = \frac{1}{2\pi} \vec{G} \cdot \vec{r} = kK + lL \in \mathbb{N}, \quad (3.106)$$

je rovnice každé z přímek daných zvoleným $\vec{G}$ dána jako

$$kx + \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(l - \frac{1}{2}k \right) y = Na, N \in \mathbb{Z}. \quad (3.107)$$

Pro dané $\vec{G} \in M_a$, tj. pro daná k a l , je $\vec{G} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k, l - \frac{1}{2}k \right)^T$ normálovým vektorem přímek a ty jsou navzájem odlišeny pouze posunem daným $N \in \mathbb{Z}$ – přímka s $N = 0$ prochází počátkem a dvě k ní nejbližší mají $N = \pm 1$. Vektoru $\vec{G} = 0$ odpovídá degenerovaná třída (podmínice (3.107) vyhoví každý bod roviny). A konečně vektory $\vec{G}$ a $w\vec{G}$ generují navzájem rovnoběžné třídy přímek.

Přímky s daným k a l a $s = \pm 1$ jsou od počátku, a tedy i od sousední přímky své třídy, vzdáleny o

$$d_{\vec{G}} = d_{k,l} \equiv \frac{\frac{\sqrt{3}}{2}a}{\sqrt{k^2 - kl + l^2}}, \quad (3.108)$$

což je tedy označení pro vzájemnou vzdálenost (sousedních) přímek v rámci dané třídy²³. Výraz pod odmocninou je pro nenulová k a l vždy kladný.

V krystalografii se k indexování tříd (nad)rovin používá tzv. Millerových indexů; protože jsou ale clustery rydbergovské hmoty "velmi konečné", nabízejí se jiné parametrizace:

- První může být pro daná k a l souřadnice takového bodu na přímce procházející počátkem, který je k počátku nejbližší. Protože přímce odpovídající počátkem odpovídá $N = 0$, vyplývá podle (3.106), že k , l a K , L jsou v relaci

$$kK + lL = 0, \quad (3.109)$$

odkud vyplývá, že uvedeným bodem bude

$$\vec{R} = a \left(\frac{l}{D_{k,l}} (1, 0)^T - \frac{k}{D_{k,l}} \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)^T \right), \quad (3.110)$$

kde $D_{k,l}$ je největší společný dělitel čísel $|k|$ a $|l|$, pokud jsou obě nenulová, a pro jedno z čísel rovných nule je dodefinován jako $D_{k,l} = \max\{|k|, |l|\}$; případ $k = l = 0$ se samozřejmě nevyšetřuje.

- Druhou možností je určit tu přímku z dané třídy, která je od počátku nejdále, ale stále protíná cluster – zřejmě se tak bude dít v některém z vrcholů. Ty (uspořádaný proti směru hodinových ručiček) v řeci K a L jsou:

$$\begin{array}{ll} (1) K = V, L = 0 & (4) K = -V, L = 0 \\ (2) K = 0, L = V & (5) K = 0, L = -V \\ (3) K = -V, L = V & (6) K = V, L = -V \end{array}$$

Každá přímka může protnout maximálně dva z těchto vrcholů. Z důvodu symetrie clusteru se stačí omezit např. na její část jeho okraje $\{K, L | K \in \{-V, \dots, +V\},$

²³rozdíl oproti reciproké mříži, kdy je ve jmenovateli u smíšeného členu opačné znaménko, je dán jiným úhlem, který svírají bazické vektory

$L = L_{\text{down}} = -\frac{1}{2}K - V + \frac{1}{2}|K|$, který obsahuje tři vrcholy clusteru $(-Va, 0)^T$, $\left(-\frac{1}{2}Va, -\frac{\sqrt{3}}{2}Va\right)^T$ a $\left(\frac{1}{2}aV, -\frac{\sqrt{3}}{2}Va\right)^T$. Daný $\vec{G} = k\vec{G}_1 + l\vec{G}_2$ generuje třídu přímek ve tvaru

$$\sqrt{3}kx + (2l - k)y + c = 0, \quad (3.112)$$

kde c se samozřejmě dá zjistit dosazením souřadnic konkrétního bodu v přímém prostoru, kterým přímka prochází. Pokud se toto provede pro tři výše uvedené vrcholy, vychází

$$\sqrt{3}kx + (2l - k)y + \sqrt{3}kVa = 0 \quad (3.113a)$$

$$\sqrt{3}kx + (2l - k)y + \sqrt{3}lVa = 0 \quad (3.113b)$$

$$\sqrt{3}kx + (2l - k)y + \sqrt{3}(l - k)Va = 0 \quad (3.113c)$$

a definuje-li se

$$v \equiv \max\{|k|, |l|, |k - l|\}, \quad (3.114)$$

jsou přímkami²⁴ nejdále od středu a přitom ještě cluster protínající v některém z vrcholů

$$\sqrt{3}kx + (2l - k)y \pm \sqrt{3}vVa = 0. \quad (3.115)$$

Vzdálenost obou z nich k počátku je $\frac{\frac{\sqrt{3}}{2}vVa}{\sqrt{k^2 - kl + l^2}}$, čehož dvojnásobek

$$D_{\vec{G}} = D_{k,l} = \frac{\sqrt{3}vVa}{\sqrt{k^2 - kl + l^2}} \quad (3.116)$$

je vlastně šířka clusteru v daném směru. Počet přímek dané třídy podle $\vec{G}$, které plochu clusteru mezi jeho okrajovými vrcholy protnou, pak tedy je

$$\eta_{k,l}^{(V)} = \frac{D_{k,l}}{d_{k,l}} + 1 = \frac{\frac{\sqrt{3}vVa}{\sqrt{k^2 - kl + l^2}}}{\frac{\sqrt{3}}{2}} + 1 = 2v_{k,l}V + 1 \quad (3.117)$$

²⁴jsou určitě dvě vzhledem k symetrii clusteru

Poslední výsledek vyhovuje předpokladům, že pro nejmenší cluster by měl vycházet roven třem, že by se mělo vždy jednat o liché číslo a že s α -násobným clusterem, resp. reciprokým vektorem by měl škálovat jako $\frac{\eta_{k,l}^{(\alpha V)} - 1}{\eta_{k,l}^{(V)} - 1} = \alpha$, resp. $\frac{\eta_{\alpha k, \alpha l}^{(V)} - 1}{\eta_{k,l}^{(V)} - 1} = \alpha$.

Vektory $\vec{G}$ a $n\vec{G}$ generují navzájem rovnoběžné třídy přímek, ale druhá jmenovaná bude mít vzájemnou vzdálenost mezi nimi n -krát menší. Nejmenší z těchto vektorů generuje třídu přímek o největších vzájemných vzdálenostech d ; ostatní třídy pak vůči této mají vzdálenosti mezi sousedními přímkami $\frac{d}{n}$. V braggovském pohledu je reflexe prvního řádu na těchto rovinách ekvivalentní reflexi vyššího (n -tého) řádu na základních – Braggova podmínka konstruktivní interference $2d \sin \alpha = n\lambda$ se pouhým přeuspořádáním na $2\frac{d}{n} \sin \alpha = \lambda$ dá snadno interpretovat jako reflexe na subrovinách o vzájemných vzdálenostech $\frac{d}{n}$. První pohled je v krystalografii obvyklejší a tento text se ho přidrží.

3.10 Omezení na vlnové délky

Je-li tedy vzájemná vzdálenost přímek/nadrovin v dané třídě $d_{k,l} = \frac{d}{n}$ ²⁵, pak jsou vlnové délky dopadajícího záření, které mohou dát vzniknout interferenčnímu obrazci, zřejmě omezeny podmínkou $|\sin \alpha| \leq 1$. To podle (3.108) implikuje

$$1 \geq |\sin \alpha| = \frac{\lambda}{2\frac{d}{n}} = \frac{\lambda}{2d_{k,l}} = \frac{\lambda}{2\frac{\sqrt{3}a}{\sqrt{k^2 - kl + l^2}}}, \quad (3.118)$$

odkud

$$\sqrt{k^2 - kl + l^2} \leq \sqrt{3} \frac{a}{\lambda} \quad (3.119)$$

pro danou vlnovou délku; nebo pro daná k a l také

$$\lambda \leq \frac{\sqrt{3}a}{\sqrt{k^2 - kl + l^2}}. \quad (3.120)$$

Umocněním na druhou vychází

$$k^2 - kl + l^2 \leq 3 \frac{a^2}{\lambda^2}, \quad (3.121)$$

což je kvadratická nerovnice; pro daná a a λ lze zvolit k jako neznámou a l jako parametr – podmínka přes diskriminant

²⁵k daným přímkám/nadrovinám je $\vec{G}_{k,l}$ kolmý

$$D = (-l)^2 - 4 \left(l^2 - 3 \frac{a^2}{\lambda^2} \right) = 3 \left(\left(\frac{2a}{\lambda} \right)^2 - l^2 \right) \geq 0 \quad (3.122)$$

určí omezení na l a v závislosti na l lze pak z nerovnice vyjádřit i omezení na k . Celkově:

$$-\frac{2a}{\lambda} \leq l \leq +\frac{2a}{\lambda} \quad (3.123a)$$

$$+\frac{l}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \sqrt{\left(\frac{2a}{\lambda} \right)^2 - l^2} \leq k \leq +\frac{l}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \sqrt{\left(\frac{2a}{\lambda} \right)^2 - l^2} \quad (3.123b)$$

Nápadná nesymetrie množiny povolených k a l je dána tím, že jsou tyto odečítány ve směrech $\vec{G}_1$ a $\vec{G}_2$, z nichž je druhý jmenovaný je rovnoběžný s kartézskou osou. Je poučné uvést pro srovnání podobnou konstrukci (l nezávislé, k závislé na l) pro mřížku čtvercové symetrie, kde

$$-\frac{a}{\lambda} \leq l \leq +\frac{a}{\lambda}, \quad (3.124a)$$

$$-\sqrt{\frac{a^2}{\lambda^2} - l^2} \leq k \leq +\sqrt{\frac{a^2}{\lambda^2} - l^2}. \quad (3.124b)$$

Podle (3.120) je maximální vlnová délka, pro kterou teoreticky ještě může dojít k netriviální difrakci, $\lambda_{\max} = \sqrt{3}a$ (např. pro $k = 1$ a $l = 0$). Je nesmírně důležitým zjištěním, že případný difrakční obrazec by mohl vznikat i pro jinou část elektromagnetického spektra než rentgenové záření, jak je v krystalografii jinak běžné – pravidelné uspořádání clusterů má mřížkovou konstantu úměrnou kvadrátu kvantového čísla a pro typických $n = 80$ je podle (1.2) $\lambda_{\max} \equiv 1.7 \mu\text{m}$, což je v infračervené oblasti, a zobrazování vnitřní struktury by tedy mohlo být přístupné i pro infračervené, viditelné a ultrafialové záření.

3.11 Multiplicita

Významnou roli hraje v difraktometrii veličina multiplicita $m_{(6)}$, která je definovaná jako počet navzájem různých tříd rovin se stejnou mezirovinnou vzdáleností; v případě hexagonální symetrie je touto veličinou už odvozené

$$d_{(k,l)} = \frac{\frac{\sqrt{3}}{2}a}{\sqrt{k^2 - kl + l^2}}, \quad (3.125)$$

které zřejmě pro daný cluster (o neměnné velikosti a neměnné mřížkové konstantě) závisí jen na výrazu pod odmocninou ve jmenovateli

$$N(k, l) \equiv k^2 - kl + l^2. \quad (3.126)$$

Úlohu tedy lze přeformulovat matematicky jako počet různých kombinací k a l , které dají zvolené číslo N podle výrazu výše. Kromě degenerovaného případu $k = 0 = l$ lze očekávat, že počet možností pro dané N by měl být násobkem šesti (lze očekávat, že pro některá N příslušné kombinace k a l nebudou existovat vůbec).

Bez hlubší přechozí analýzy dá $N = 1$ právě šest k počátku nejbližších bodů reciproké mřížky – proti směru hodinových ručiček

$$k = 1, l = 0 \quad (3.127a)$$

$$k = 1, l = 1 \quad (3.127b)$$

$$k = 0, l = 1 \quad (3.127c)$$

$$k = -1, l = 0 \quad (3.127d)$$

$$k = -1, l = -1 \quad (3.127e)$$

$$k = 0, l = -1 \quad (3.127f)$$

Jim odpovídající vektory reciproké mříže $\vec{G}_{k,l}$ jsou spojeny rotací o úhel $\frac{\pi}{3}$, tedy i dvojice sousedních k a l by měly být spojeny nějakou relací – tou je

$$(k, l) \rightarrow (k - l, k). \quad (3.128)$$

I pro $N > 1$ existují podobně spojené šestice. Je-li první dán jako (k, l) , pak třetí a pátý jsou $(-l, k - l)$ a $(l - k, -k)$ a tyto tři v součtu po složkách dají $(0, 0)$, což odpovídá rozkladu (3.96), kde tři vektory v argumentech dají v součtu vektor nulový. Tím, že jsou (k, l) uspořádány do šestic, kde jeden opakovanou transformací (3.128) vygeneruje ostatní, se pro zkoumání multiplicit stačí omezit na šestinu roviny – např. sextant (3.95) – a výsledek nalezený v něm násobit šesti.

Multiplicita rovná šesti vychází kromě $N = 1$ i pro $N = 3$ (v $M_a^{(6)}$ mu odpovídá $k = 1, l = -1$) a $N = 4$ ($k = 2, l = 0$), ale například pro $N = 2$ je nulová, protože žádná kombinace $k, l \in \mathbb{Z}^2$ vycházející rovná dvěma jako výraz $k^2 - kl + l^2$ neexistuje.

První výskyt multiplicity rovné dvanáct nastává pro $N = 7$, kdy v sextantu $k > 0, l \leq 0$ takto vycházejí kombinace $k = 2, l = -1$ a $k = 1, l = -2$ (v sousedním segmentu po směru hodinových ručiček pak $k = 3, l = 1$ a $k = 3, l = 2$, které lze získat použitím transformace (3.128) na předchozí dvojici řešení, ale nejsou s její pomocí převoditelná navzájem, může se tedy v tomto smyslu hovořit o nezávislých řešeních.

První výskyt multiplicity vyšší než dvanáct, konkrétně osmnáct, vychází pro $N = 49 - k = 3, l = -5, k = 5, l = -3, k = 7, l = 0$ v $M_a^{(6)}$ –, kde lze hovořit o třech nezávislých řešeních v každém ze sextantů.

Obecně nalezení multiplicity vychází z řešení kvadratické rovnice

$$k^2 - kl + l^2 - N^2 = 0, \quad (3.129)$$

která má řešení

$$k_{\pm} = \frac{1}{2} \left(l \pm \sqrt{4N^2 - 3l^2} \right); \quad (3.130)$$

N je pevné a l je parametr. Protože k a l jsou celočíselná, musí být zjevně celočíselná i odmocnina, tj. musí existovat nějaké $M \in \mathbb{Z}_0^+$ tak, aby

$$4N^2 - 3l^2 = M^2, \quad (3.131)$$

odkud

$$l^2 = \frac{4N^2 - M^2}{3}. \quad (3.132)$$

Protože $l^2 \geq 0$, musí $M^2 \leq 4N$, tedy $M \leq \sqrt{4N} = 2\sqrt{N}$; zároveň je ale $M \in \mathbb{Z}_0^+$, takže

$$M \in \left\{ 0, \dots, \left\lfloor 2\sqrt{N} \right\rfloor \right\}, \quad (3.133)$$

kde $\lfloor \cdot \rfloor$ značí dolní celou část reálného čísla.

Algoritmus pro určení multiplicity je tedy ekvivalentní s algoritmem nalezení různých řešení rovnice $k^2 - kl + l^2 = N^2$ pro pevně zvolené N^{26} a pro $k > 0, l \leq 0$ a funguje následovně: s daným N je pevně určena i množina $M \in \left\{ 0, \dots, \left\lfloor 2\sqrt{N} \right\rfloor \right\}$; pro každé toto M se testuje, je-li výraz $\frac{4N^2 - M^2}{3}$ kvadrátem nějakého celého čísla a pokud ano, je tímto číslem číslo $-l$, kterému se pak snadno přiřadí $k = \frac{1}{2} \left(l + \sqrt{4N^2 - 3l^2} \right) = \frac{1}{2}(l + M) = \frac{1}{2} \left(M - \sqrt{\frac{4N^2 - M^2}{3}} \right)$. Není třeba testovat, jestli k nevychází jako poločíselný zlomek, protože to by mohlo nastat jen pro l a M s opačnou paritou, a to je vyloučeno relací $M^2 = 4N - 3l^2$; také není třeba vyšetřovat $l = 0$ a $l > 0$ zvlášť; a konečně není třeba testovat, jestli k vychází jako kladné číslo, pokud se množina testovaných M zúží na $\left\{ \left\lfloor \sqrt{N} + 1 \right\rfloor, \dots, \left\lfloor 2\sqrt{N} \right\rfloor \right\}$, jak plyne z podmínky $k = \frac{1}{2} \left(M - \sqrt{\frac{4N^2 - M^2}{3}} \right) > 0$.

²⁶mezi mezi(nad)rovinnou vzdáleností $d_{k,l}$ a N platí vztah $d_N = \frac{\frac{\sqrt{3}}{2}a}{\sqrt{k^2 - kl + l^2}} = \frac{\frac{\sqrt{3}}{2}a}{N}$

I když pro malý cluster nehrají velké multiplicity příliš roli, existence a první výskyty (ve smyslu nejnižšího $N = N_{\min}$) daných multiplicit je zajímavá sama o sobě. Pokud se výše popsaný algoritmus nechá provést v počítači, ukazuje se, že některé multiplicity se (alespoň do meze $N = 100000$ testované numericky) nevyskytují vůbec, zatímco první výskyty $N_{\min}$ jsou faktorizovatelné do magických a polomagických čísel:

$m_{(6)} = 6$	$N_{\min} = 1$
$m_{(6)} = 12$	$N_{\min} = 7$
$m_{(6)} = 18$	$N_{\min} = 49 = 7 \cdot 7$
$m_{(6)} = 24$	$N_{\min} = 91 = 7 \cdot 13$
$m_{(6)} = 30$	nevyskytují se
$m_{(6)} = 36$	$N_{\min} = 637 = 7 \cdot 7 \cdot 13$
$m_{(6)} = 42$	nevyskytují se
$m_{(6)} = 48$	$N_{\min} = 1729 = 7 \cdot 13 \cdot 19$
$m_{(6)} = 54$	$N_{\min} = 8281 = 7 \cdot 7 \cdot 13 \cdot 13$
$m_{(6)} = 60$	nevyskytují se
$m_{(6)} = 66$	nevyskytují se
$m_{(6)} = 72$	$N_{\min} = 12103 = 7 \cdot 7 \cdot 13 \cdot 19$
$m_{(6)} = 78$	nevyskytují se
$m_{(6)} = 84$	nevyskytují se
$m_{(6)} = 90$	nevyskytují se
$m_{(6)} = 96$	$N_{\min} = 53599 = 7 \cdot 13 \cdot 19 \cdot 31$

3.12 Fourierův obraz konečného Diracova hřebenu s šestičetnou symetrií

V jednom rozměru platilo, že Fourierův obraz nekonečného Diracova hřebenu je nekonečný Diracův hřeben v recipročním prostoru ($\mathcal{F}(\sum_{K \in \mathbb{Z}} \delta(x - aK)) = \frac{2\pi}{a} \sum_{G \in M_a} \delta(\Lambda - G)$), zatímco Fourierův obraz konečného Diracova hřebenu má za obraz nekonečnou $\frac{2\pi}{a}$ -periodickou funkci lokalizovanou kolem bodů reciproké množiny tím ostřeji, čím větší oblast v přímém prostoru konečný Diracův hřeben zabírá.

O konečném, hexagonálně-symetrickém Diracově hřebenu ve dvou rozměrech, konkrétně sadě delta funkcí rozmístěných v uzlech přímého prostoru clusteru rydbergovské hmoty

$$\tilde{D}_V^{(6)}(\vec{r}) = \sum_{K,L \in \tilde{M} \subset \mathbb{Z}^2} \delta(\vec{r} - a(K\vec{e}_K + L\vec{e}_L)) \quad (3.134)$$

lze mít podobná očekávání²⁷; V značí velikost uvažovaného Diracova hřebenu, ať konečného (cluster), nebo nekonečného. Protože vzorem je a -periodická funkce s hexagonální symetrií, nenulová jen v uzlech přímé mříže $\vec{r}_{K,L}$, měla by obrazem být $\frac{2\pi}{a}$ -periodická hexagonálně symetrická funkce (jen pootočená oproti přímé mříži) v (reciproké) proměnné $\vec{\Lambda}$ a s maximy v uzlech reciproké mříže $\vec{G}_{k,l}$. Byla vyslovena hypotéza, že Fourierův rozklad takové funkce bude možný do součinů tří kosinů se speciální vazbou mezi argumenty. Formulace této hypotézy byla pro hexagonálně symetrické funkce v přímém prostoru, $\mathcal{F}[\tilde{D}_V^{(6)}(\vec{r})]$ ale bude funkce reciproké proměnné $\vec{\Lambda}$. Protože jsou ale přímá a reciproká souřadnice matematicky záměnné, stačí hypotézu přeformulovat: Každá $\frac{2\pi}{a}$ -periodická funkce s hexagonální symetrií lze rozložit do Fourierovy řady jako

$$n(\vec{\Lambda}) = \sum_{\vec{R} \in \tilde{M}_a^{(6)}} \tilde{C}_{\vec{R}} \cos_{(3)}\left(\vec{\Lambda}; \frac{\vec{R}}{2}\right), \quad (3.135)$$

kde je

$$\tilde{M}_a^{(6)} \equiv \{\vec{0}\} \cup \{\vec{R} = K\vec{e}_K + L\vec{e}_L | K > 0, L \geq 0\}, \quad (3.136)$$

tedy sextant přímé mříže, popř. nějaká jeho podmnožina pro cluster o konečné velikosti; vymezení sextantu respektuje, že na rozdíl od reciprokého prostoru svírají směry odpovídajícím celým čísly (zde K a L) úhel $\frac{\pi}{3}$. Je tedy třeba i nahradit transformaci (3.128), která po směru hodinových ručiček doplní odpovídajících pět vrcholů z ostatních sextantů, konkrétně za

$$(K, L) \rightarrow (-L, K + L). \quad (3.137)$$

Protože je Fourierova transformace lineární ($\mathcal{F}[f_1 + f_2] = \mathcal{F}[f_1] + \mathcal{F}[f_2]$), může výpočet zjednodušit vhodné uspořádání sčítanců. Například pro Diracův hřeben clusteru o velikosti $V = 2$ je možné nejprve určit Fourierův obraz Diracova hřebenu menšího clusteru s $V = 1$ a následně přičíst Fourierův obraz doplňku, tedy uzlů, které má větší cluster navíc. Tento postup lze zobecnit – ke střednímu uzlu přidávat po šestiúhelnících podle velikosti (nejprve o šesti uzlech, pak dvanácti, osmnácti apod. – stejně jako v první možnosti

²⁷způsoby, jak zvolit $\tilde{M}$, aby vznikl pravidelný šestiúhelníkový cluster, byly probrány v sekci 3.8; jak bude zřejmé, rozbor bude použitelný i pro cluster tvaru neúplného šestiúhelníků, např. s 55 uzly (což je polomagické číslo)

sčítání uzlů v sekci o počtu uzlů v clusteru) a v rámci každého z těchto šestiúhelníku uzly uspořádat do šestic spojených transformací (3.137).

Pro nejmenší cluster ($V = 1$) je

$$\begin{aligned}\tilde{M}_a &= \left\{ \vec{R} = K\vec{e}_K + L\vec{e}_L \mid (K, L) = \right. \\ &= (0, 0), (1, 0), (0, 1), (-1, 1), (-1, 0), (0, -1), (1, -1) \left. \right\}\end{aligned}\quad (3.138)$$

a jeho Fourierův obraz potom tedy:

$$\begin{aligned}\mathcal{F} \left[\tilde{D}_1^{(6)}(\vec{r}) \right] (\vec{\xi}) &= \mathcal{F} \left[\sum_{\vec{R} \in \tilde{M}_a} \delta(\vec{r} - \vec{R}) \right] (\vec{\xi}) = \sum_{\vec{R} \in \tilde{M}_a} e^{-i2\pi \vec{R} \cdot \vec{\xi}} = \\ &= e^{-i2\pi a(-\vec{e}_K + \vec{e}_L) \cdot \vec{\xi}} + e^{-i2\pi a(\vec{e}_L) \cdot \vec{\xi}} + \\ &+ e^{-i2\pi a(-\vec{e}_K) \cdot \vec{\xi}} + e^0 + e^{-i2\pi a(\vec{e}_K) \cdot \vec{\xi}} + \\ &+ e^{-i2\pi a(-\vec{e}_L) \cdot \vec{\xi}} + e^{-i2\pi a(\vec{e}_K - \vec{e}_L) \cdot \vec{\xi}} = \\ &= 1 + e^{-i2\pi a(-\vec{e}_K) \cdot \vec{\xi}} + e^{-i2\pi a(\vec{e}_K) \cdot \vec{\xi}} + \\ &+ e^{-i2\pi a(\vec{e}_L) \cdot \vec{\xi}} + e^{-i2\pi a(-\vec{e}_L) \cdot \vec{\xi}} + \\ &+ e^{-i2\pi a(-\vec{e}_K + \vec{e}_L) \cdot \vec{\xi}} + e^{-i2\pi a(\vec{e}_K - \vec{e}_L) \cdot \vec{\xi}} = \\ &= 1 + 2 \left(\cos 2\pi a \vec{e}_K \cdot \vec{\xi} + \cos 2\pi a (-\vec{e}_L) \cdot \vec{\xi} + \cos 2\pi a (\vec{e}_L - \vec{e}_K) \cdot \vec{\xi} \right) = \\ &= -1 + 8 \cos \frac{2\pi a \vec{e}_K \cdot \vec{\xi}}{2} \cos \frac{2\pi a (-\vec{e}_L) \cdot \vec{\xi}}{2} \cos \frac{2\pi a (\vec{e}_L - \vec{e}_K) \cdot \vec{\xi}}{2} = \\ &= [\Lambda = 2\pi \xi] = -1 + 8 \cos \frac{a \vec{e}_K \cdot \vec{\Lambda}}{2} \cos \frac{a (\vec{e}_L - \vec{e}_K) \cdot \vec{\Lambda}}{2} \cos \frac{a (-\vec{e}_L) \cdot \vec{\Lambda}}{2} = \\ &= -1 + 8 \cos_{(3)} \left(\vec{\Lambda}; \frac{\vec{e}_K}{2} \right)\end{aligned}\quad (3.139)$$

Tento obraz má tedy očekávanou formu, bylo ovšem nutné uvážit, že vektory přímé mříže svírající po dvojicích úhel $\frac{2\pi}{3}$, a tedy spojené rotací a vzájemným vyrušením v součtu jsou $\vec{e}_K$, $\vec{e}_L - \vec{e}_K$ a $-\vec{e}_L$.

Pro cluster o velikosti $V = 2$ je Fourierův obraz přímé mříže součtem Fourierova obrazu předchozího clusteru a zbylého šestiúhelníku, tvořeném dvěma šesticemi. Fourierův obraz jedné z této šestice je zřejmě možné získat prostou záměnou $\vec{e}_K \rightarrow 2\vec{e}_K$ v druhém (nekonstantním) členu předchozího výsledku a obraz druhé šestice lze nalézt stejným algebraickým postupem – výsledek bude opět struktury součinu tří kosinů, protože šestice je spojena transformací (3.137). Vyjde tedy

$$\begin{aligned} \mathcal{F} \left[\tilde{D}_2^{(6)} \right] (\vec{\Lambda}) &= -5 + 8 \cos_{(3)} \left(\vec{\Lambda}; \frac{\vec{e}_K}{2} \right) + \\ &+ 8 \cos_{(3)} \left(\vec{\Lambda}; \frac{2\vec{e}_K}{2} \right) + 8 \cos_{(3)} \left(\vec{\Lambda}; \frac{\vec{e}_K + \vec{e}_L}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.140)$$

kde absolutní člen rovný pěti má původ v operaci $-1 + 2 \cdot 3$.

Pro cluster obecné velikosti se postup bude držet stejného schématu (vždy jde rozdělit na centrální uzel a šestice spojené transformací (3.137) vyjádřitelných jako součin tří kosinů) a výsledkem bude

$$\mathcal{F} \left[D_V^{(6)} \right] (\vec{\Lambda}) = -1 + V(V+1) + 8 \sum_{\vec{R} \in \tilde{M}_a^{(6)}} \cos_{(3)} \left(\vec{\Lambda}; \frac{\vec{R}}{2} \right), \quad (3.141)$$

protože $V(V+1) = \frac{\#V-1}{3}$ a kde $\tilde{M}_a^{(6)}$ je sextant podle (3.136) nebo nějaká jeho podmnožina – pro cluster velikosti V tvaru pravidelného šestiúhelníku je $K = 1, \dots, V, L = 0, \dots, V-K$.

Funkce má tedy formu (Fourierův rozklad) v souladu s vyslovenou hypotézou. Význam Fourierova obrazu konečného Diracova hřebenu (clusteru) pro difrakční spektrum spočívá v představě, že difrakční obraz je mapa reciproké mříže, resp. Fourierovým obrazem mříže přímé.

3.13 Netriviální difrakční obrazec

Nechť na vzorek, v němž se nacházejí clustery rydbergovské hmoty, dopadá monochromatické záření o vlnovém vektoru $\vec{k} = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_{\vec{k}}$, kde $\vec{e}_{\vec{k}}$ je jednotkový bezrozměrný vektor ve směru $\vec{k}$, a to je vzorkem reflektováno do obecného směru $\vec{k}'$; rozptyl je uvažován pouze pružný, tj. $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$. Úvahy v této sekci vychází z obecného pravidla [22]

užívaného v difraktometrii, že ke konstruktivní interferenci difraktovaného záření dochází jen ve směrech splňujících

$$\vec{k}' - \vec{k} \left(\equiv \Delta \vec{k} \right) = \vec{G}, \quad (3.142)$$

kde $\vec{G}$ je libovolný vektor reciproké mříže difrakčního média (např. clusterů). Vektor $\vec{k}$ obvykle nejde přizpůsobovat, protože má v laboratoři pevnou polohu (danou pozicí zdroje, monochromátoru, kolimátoru apod.).

Velmi názorným způsobem jak zjistit, je-li pro nějaké $\vec{G}$, resp. některý $\vec{k}'$ podmínka (3.142) splněna, je (grafická) konstrukce tzv. Ewaldsovy sféry [22]. Protože $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$, je (3.142) interpretovatelná jako rovnoramenný trojúhelník s kružnicí o poloměru $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ se středem ve vrcholu sevřeném vektory $\vec{k}$ a $\vec{k}'$ (tedy proti základně) a protínající zbylé dva vrcholy (u základny). Velikost základny rovnoramenného trojúhelníka ani úhly u vrcholů nejsou předem dány, ale nabývají všech takových hodnot, právě aby velikost základny byla rovna velikosti některého vektoru v reciproké mříži a aby platila vektorová relace (3.142) vzhledem k $\vec{k}$, které je obvykle v prostoru pevné co do orientace; orientace všech $\vec{G}$ pak musí odpovídat reálné orientaci periodicky uspořádaného difraktujícího média, neboť reciproká mříž se natáčí spolu s přímou mříží.

Pro nahodilou orientaci reciproké mříže a libovolné, ale pevné $k = |\vec{k}|$ je podmínka (3.142) splněna leda velkou shodou okolností. Pro zaručení toho, aby byl difrakční obrazec netriviální (tedy aby nebyl v každém směru $\vec{k}'$ nulový difrakční signál) se musí některý z parametrů experimentu spojitě měnit [22] – buď se místo monochromatického spektra použije spektrum široké, nebo se se vzorkem otáčí (tzv. metoda rotujícího/otáčivého krystalu) nebo se vzorek připraví tak, aby byl složen z obrovského množství malých krystalků²⁸, jejichž obecné orientace mohou pokrýt všechny možnosti²⁹ (tzv. prášková metoda). Posledně jmenované metodě uspořádání experimentu s clustery rydbergovské hmoty patrně dobře odpovídá, protože o nich se předpokládá, že se budou vyskytovat volně v prostoru (ve vakuu) o obecné orientaci. Potíží ale je, jak už bylo řečeno, že reciproká mříž clusteru je degenerována z množiny izolovaných bodů do soustavy rovnoběžných přímek (kolmých na rovinu clusteru) vlivem striktně rovinného uspořádání. Potom jsou ale spojitě parametry systému hned dva – orientace clusterů v prostoru a (po částech) i reciproká mříž –, takže difrakční spektrum bude triviální opačným způsobem: místo aby žádný směr splňující (3.142) obecně neexistoval, bude

²⁸ale takových, aby měly původní periodicitu

²⁹samořejmě pokud je k ostré hodnotě $\vec{G}$ uvážena určitá tolerance, např. ve smyslu (3.35); orientace mohou být i časově proměnné

naopak (3.142) splněna pro všechny směry $\vec{k}'$, jak lze snadno nahlédnout.

Aby byl počet spojitých parametrů takový, že vznikne netriviální difrakční obrazec, je nutné podmínky, ve kterých se vzorek nachází, upravit. Zřejmě změna povahy spektra dopadajícího záření nic nezlepší, protože monochromatické záření nevyhovuje a přechodem k širšímu spektru by se přidal dokonce třetí spojitý parametr. Nabízejí se jiné tři možnosti:

- Clustery mohou být ulpělé na vnitřních stěnách oblasti, kde vznikají, a budou mít tedy pevnou orientaci vůči dopadajícímu svazku. Taková difrakce je pak v principu podobná skenování povrchu pevné látky [22].
- Clustery jsou volně v prostoru daleko od stěn, ale jejich orientace je nějak vynucovaná – toho může být dosaženo například magnetickým polem, protože podle dosavadních znalostí clusteru rydbergovské hmoty ve vnějším magnetickém poli orientují svůj magnetický dipól (kolmý k jejich rovině) podle vnějšího pole, takže pro dosažení difrakčního obrazce by stačila vhodná (a pevná) vzájemná orientace magnetických siločar a dopadajícího svazku. I tento postup by byl blízký skenování povrchu jako v předchozím bodě, pouze by se tak dělalo v prostoru.
- Asi nejzajímavější možností, ve které není vůbec potřeba, aby byla řízena poloha nebo vzájemná orientace clusterů a dopadajícího záření (a tedy je práškové metodě nejpodobnější), spočívá ve využití jiné vlastnosti rydbergovské hmoty související s jejich magnetickými dipóly – clusteru mají totiž mít schopnost se řadit do vláken – v nich jsou roviny clusterů prakticky³⁰ rovnoběžné. Výsledkem je objekt, jehož periodické uspořádání už je trojrozměrné a jehož difrakční spektrum by se kvalitativně nemělo nijak zvlášť lišit od práškové metody; teoreticky ale existuje způsob, jak tento třetí směr vyřadit a zkoumat pouze dvourozměrné uspořádání v rámci clusterů. Podle rešerše v první kapitole může být vzájemná vzdálenost mezi paralelními clusteru ($d_{\text{par.}}$) ve vlákne menší, než kolik je mřížková konstanta v rovině clusteru (a), a v tomto směru je tedy reciproká mříž řidší – zvolí-li se vlnová délka záření λ tak, aby

$$2d_{\text{par.}} \leq \lambda \leq \sqrt{3}a, \quad (3.143)$$

³⁰až na možnost, že se vlákno může pozvolna ohýbat a kroutit, to by se ale mělo projevit jen určitým rozšířením difrakčních píků tak, jak je známo u jiných systémů, jejichž pravidelné uspořádání je přechodné nebo na krátkých vzdálenostech, např. v tekutinách

bude pro dopadající záření struktura v podélném směru podél vláken v difrakčním smyslu nedostupná a efektivně (jako součást takového vlákna) pak bude mít dvou-rozměrný cluster libovolně orientovaný i v třírozměrném prostoru reciprokou mříž danou izolovanými body místo nekonečných přímek. Zmenšováním vlnové délky dopadajícího záření by pak v určitý okamžik mohlo dojít ke kvalitativnímu skoku³¹ v podobě difrakčního spektra tím, jak by pro záření byl přístupný i třetí směr – tak by mohlo být možné podat experimentální doložení, že struktury v podobě vláken rydbergovské hmoty existují.

V práškové metodě je volnost na úhel orientace trojúhelníku vektorů podle (3.142) vůči směru $\vec{k}$ a difraktované záření sleduje plášť tzv. Debye-Scherrerových kuželů [22]; vrcholový úhel kužele je

$$\theta_{\vec{G}_{k,l}} = \arcsin \frac{\lambda |\vec{G}_{k,l}|}{4\pi} \quad (3.144)$$

a je roven dvojnásobku úhlu proti základně rovnoramenného trojúhelníku (3.142). Omezení na $\vec{G}_{k,l}$ vzhledem k λ byly probrány v sekci Omezení na vlnové délky.

Ve struktuře difrakčního spektra by se měla potvrdit (nebo také vyvrátit) domněnka, že se elektrony sdružují v blízkosti hranic Wigner-Seitzových buněk, tím, že by tomu odpovídající difrakční píky byly silnější. Tento jev se vystihuje formfaktorem, který ale jde za rámec této práce.

³¹v řeči Millerových indexů by k $(a, b, 0)$ přibyl i $(\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c})$, $\tilde{c} \neq 0$

Kapitola 4

LCAO metoda pro nejmenší cluster rydbergovské hmoty

Tato kapitola se bude zabývat spektrem rydbergovské hmoty, hlavně pro nejmenší cluster s $V = 1$ a s atomy vodíku v (sedmi) uzlech přímé mříže. Analýza vychází ze spektra osamocené atomu vodíku daného Rydbergovou formulí

$$W_n = -\frac{R_\infty}{n^2}, n \in \mathbb{N}, \quad (4.1)$$

kde $R_\infty = \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2$ je Rydbergova konstanta atomu vodíku. Rydbergova formule v tomto základním přiblížení (energie atomu vodíku v klidu závisí jen na hlavním kvantovém čísle n a je druhého řádu v konstantě jemné struktury α) je odvoditelná v mnoha modelech – od Bohrova modelu (z podmínky kvantování momentu hybnosti, de Broglieho vlny nebo z principu korespondence), přes (radiální) Schrödingerovu rovnici systému po Diracovu rovnici atomu vodíku. Unikátnost atomu vodíku ve všech jmenovaných modelech spočívá v účasti pouze dvou objektů (elektronu a jádra s opačným nábojem) na tvorbě vázaného systému ("úloha dvou těles"), který je matematicky převoditelný na úlohu jednoho tělesa v neměnném vnějším potenciálu¹. Neměnnost tohoto poneciálu umožňuje v principu znázornit celé jeho spektrum do diagramu, který je kvalitativně i kvantitativně univerzální pro všechny energie.

Pokud se na cluster rydbergovské hmoty pohlíží jako na molekulu, lze předpokládat, že jeho existence je podmíněna (mimo jiné) tím, že je pro atomy tvořící cluster energeticky výhodnější tvořit společný celek než se vyskytovat každý jednotlivě². Energie každého z (izolovaných) atomů je záporná (konkrétně rovná $-\frac{R_\infty}{n^2}$) a vazbová energie

¹u atomu vodíku samozřejmě coulombickém

²v souladu s rešerší, díky sdílení elektronů

zvlášť také – v případě clusteru rydbergovské hmoty se ale druhá jmenovaná energie musí řídit podmínkou, která není obvyklá ani ve fyzice molekul, ani ve fyzice pevných látek. Tou podmínkou je specifičnost přímé mřížky clusteru rydbergovské hmoty zvětšovat svou velikost podle excitace atomů v uzlech³. Pro cluster s libovolnou pozorovanou velikostí V zdroje uvádějí závislost parametru mřížky⁴ na hlavním kvantovém čísle atomů v uzlech jako

$$a_n \cong 2.9a_0n^2, \quad (4.2)$$

kde $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \cong 5.291772 \cdot 10^{-11}$ m je tzv. (klasický) Bohrov poloměr základního stavu atomu vodíku. Těsnému hexagonálnímu uspořádání v rovině by odpovídala vzájemná vzdálenost jader v uzlech $2a_0n^2$ – konečkonců v Bohrově modelu jsou elektrony lokalizovány na kružnici o poloměru a_0n^2 a s rostoucím n by měl být elektron stále lokalizovanější, a tedy i "klasičtější". V pevných látkách se předpokládá mřížka jako tuhá, takřka netečná k vnějším vzruchům (např. mechanickým tlakům) nebo stavům elektronů uvnitř mříže – to činí z rydbergovské hmoty určitě zajímavý objekt ke zkoumání. V tomto ohledu je rydbergovská hmota lépe připodobnitelná k elektronickým přechodům v molekulách, kde se podle Born-Oppenheimerova přiblížení systém nachází pro každý kvantový stav obecně v jiném potenciálu jader (který je ovšem zase závislý na kvantovém stavu); u rydbergovské hmoty se situace zjednodušuje alespoň v tom smyslu, že empirický vztah $a_n \cong 2.9a_0n^2$ rovnou poskytuje rozložení jader a elektronů v clusteru – v prvním přiblížení, ale uspokojivě.

Z rešerše vychází rovněž předpoklad, že stavy jednotlivých atomů v clusteru by měly být stejné. Protože by každý z elektronů měl být do určité míry lokalizovaný na kružnici v rovině clusteru, mělo by se alespoň po formální stránce jednat o (v principu) jednorozměrný pohyb. Je vhodné alespoň ilustrativně demonstrovat význačnost závislosti prostorového rozměru clusteru na kvantovém stavu na nějakém jiném jednorozměrném systému s parametrem proměnným podle kvantového stavu.

4.1 Model jámy s konečnou hloubkou a šířkou proměnnou podle kvantového stavu částice

Takovým vhodným modelem je částice o hmotnosti M v jednorozměrné potenciálové jámě konečné hloubky, tj. částice řídicí se jednorozměrnou Schrödingerovou rovnicí

³jinými slovy, se změnou kvantového stavu se změni i parametry potenciálů

⁴a tedy i vzájemné vzdálenosti sousedních atomů

$$\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + \frac{2M}{\hbar^2}(W_n - V(x))\psi_n(x) = 0, \quad (4.3)$$

kde potenciál má tvar

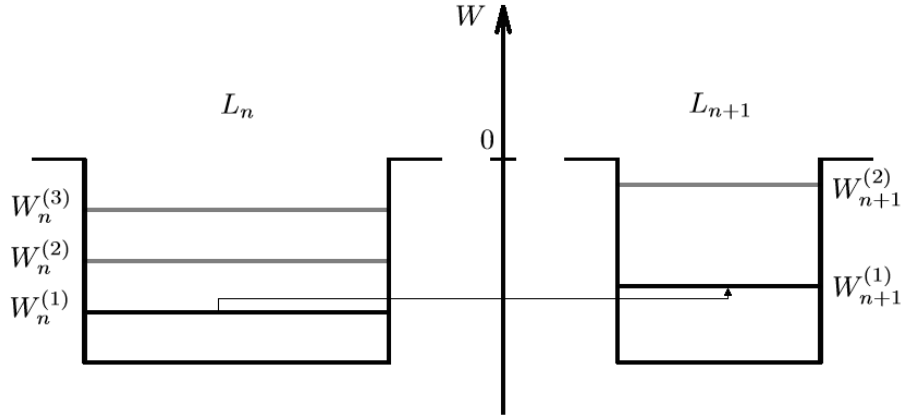
$$V(x) = \begin{cases} V_0 < 0 | x \in (-\frac{L}{2}, +\frac{L}{2}) \\ 0 \text{ jinak,} \end{cases} \quad (4.4)$$

a kde je energie i vlnová funkce parametrizovaná jediným kvantovým číslem n . Pozornost je samozřejmě věnována pouze o vázaným řešením $V_0 \leq E < 0$. Úloha je poměrně běžnou součástí vysokoškolských kurzů, není tedy třeba rozebírat její řešení v plné obecnosti, pouze budou zopakovány důležité poznatky:

- Protože je potenciál symetrický a vlnová funkce jednorozměrná, musí být vlnová funkce buď jen sudá, nebo jen lichá.
- Je vhodné zavést bezrozměrné $y_0^2 \equiv \frac{(-V_0)ML^2}{2\hbar^2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{(-V_0)}{Mc^2} \cdot \left(\frac{L}{\Lambda_C}\right)^2$ – potom mají všechna řešení podobu $W_n = V_0 \left(1 - \frac{y_0^2}{y^2}\right)$, kde y je řešením algebraické rovnice $\tan y = \sqrt{\frac{y_0^2}{y^2} - 1}$ pro sudé vlnové funkce a $-\cotan y = \sqrt{\frac{y^2}{y_0^2} - 1}$ pro liché. Rovnice jsou důsledkem požadavku, aby vlnová funkce byla všude spojitá včetně své první derivace.
- Celkový počet řešení je roven $\left\lfloor \frac{2y_0}{\pi} \right\rfloor + 1$ a vždy existuje alespoň jedno řešení (a to je sudé). Spektrum W_n tvoří konečnou rostoucí posloupnost. Platí, že čím více je řešení, tím blíže je y pro nejnižší sudý stav blíže k $\frac{\pi}{2}$.

Uvedený rozbor vychází z předpokladu, že při přeskokách mezi energetickými stavy se vnější parametry systému (zde V_0 a L) nemění. Nechť je tento předpoklad nyní zobecněn, aby byla získána představa o důsledcích takového úpravy zadání. Nejprve je nutné vlastní stavy přesněji definovat: Pokud je na problém pohlíženo jako na oddělené problémy (podle n) s různými parametry, je zřejmé, že každá sada parametrů L_n a $V_{0(n)}$ generuje sama o sobě obecně více než jedno řešení, ale lze předpokládat, že obsazen (preferován) bude nejnižší z nich – nabízí se tedy definovat, že stav s daným n je právě ten s nejnižší energií. O tomto stavu je zřejmé, že se jedná o sudou funkci a že vždy existuje. Situaci ilustruje 4.1. Je přehlednější nechat V_0 pevné a měnit s n jen L jako L_n – pak bude $y_0 = y_{0(n)} = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{(-V_0)}{Mc^2} \frac{L_n}{\Lambda_C}}$

Pokud by posloupnost L_n , která samozřejmě může mít nekonečně mnoho členů, byla zavedena jako rostoucí, vyšlo by z povahy potenciálové jámy energetické spektrum jako



Obr. 4.1: Dvě sousední jámy ve smyslu posloupnosti L_n a spektra možných energií v nich. Širší jáma (se šířkou L_n) má tři vázané stavy, nejnižší z nich je $W_n^{(1)}$. Užší jáma (se šířkou L_{n+1}) má sice (shodou okolností) o jeden vázaný stav méně, ale nejnižší z nich ($W_{n+1}^{(1)}$) je na vyšší energii než nejnižší v jámě s šířkou L_n . Obě jámy mají uprostřed nulovou souřadnici, jinak by se musely znázornit jedna přes druhou a to bylo nebylo přehledné. Dojde-li k excitaci ze stavu s energií $W_n^{(1)}$, nemůže se tak stát na stavy s energiemi $W_n^{(2)}$ nebo $W_n^{(3)}$, protože podle definice konstruovaného problému je excitace doprovázena změnou velikosti jámy – a mezi stavy s energiemi $W_{n+1}^{(1)}$ a $W_{n+1}^{(2)}$ je rovněž z definice konstrukce volen první jmenovaný, tedy nejnižší. Povolený přechod je vyznačen tenkou šipkou. Stavy, které se v konstrukci celého spektra ignorují, jsou znázorněny šedivě. Pokud je vhodně zvolena posloupnost L_n , může být posloupnost energií $W_n = W_n^{(1)}$ rostoucí i pro $n \in \mathbb{N}$.

klesající, což je v rozporu s přirozeným chápáním n jako excitace. Pokud by byla zvolena posloupnost klesající jako $\frac{L_1}{n}$, byla pro nízká n posloupnost správně rostoucí, ale pro vysoká by jednak nastaly výpočetní obtíže a monotonie spektra by nebyla zaručena. Asi nejvhodnější z jednoduchých možností je volba, aby parametr L_n klesal od nějakého L_1 až k L_∞ , přičemž aby platilo

$$L_\infty \gg \sqrt{\frac{2}{\frac{(-V_0)}{Mc^2}}} \cdot \Lambda_C y, \quad (4.5)$$

kde y je opět řešením rovnice

$$\sqrt{\frac{y_{0(n)}^2}{y^2} - 1} = \begin{cases} \tan y, \psi(x) = \psi(-x) \\ -\cotan y, \psi(x) = -\psi(-x). \end{cases} \quad (4.6)$$

Tento požadavek bude zřejmý záhy. Může se zdát těžké ho ověřit, neboť formálně y závisí přes $y_{0(n)}$ na samotném L_n také, ale podle definice stavu ψ_n s proměnnými vnějšími parametry se pro dané n uvažuje jen nejnižší možnou energii a pro ni je vždy $0 < y < \frac{\pi}{2}$. Problém je tedy formulován jako částice v potenciálové jámě s proměnným parametrem L_n , kde ψ_n je pro dané L_n právě jen ta vlnová funkce, která má nejnižší energii, a velikost jámy klesá jako

$$L_n = L_\infty + \frac{L_1 - L_\infty}{n}, n \in \mathbb{N}. \quad (4.7)$$

Konstrukci řešení je na rozdíl od případu jámy s neměnnými parametry diskutovaného výše vhodné alespoň stručně naznačit. Pro dané L_n se hledá sudé řešení s nejnižší energií, které určitě existuje. Schrödingerova rovnice závislá na parametru L_n má vně jámy podobu

$$\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + \frac{2M}{\hbar^2}W_n\psi_n(x) = 0 \Rightarrow \psi''(x) + \frac{1}{\Lambda_C^2} \cdot \frac{2W_n}{Mc^2}\psi(x) = 0, \quad (4.8)$$

jejímž integrabilním řešením je

$$\psi_n(x) = Ae^{-\frac{\sqrt{-2MW_n}}{\hbar}|x|} = Ae^{-\sqrt{-\frac{2W_n}{Mc^2}} \cdot \frac{|x|}{\Lambda_C}}; \quad (4.9)$$

uvnitř jámy se pak řeší rovnice

$$\psi''(x) + \frac{1}{\Lambda_C^2} \cdot \frac{2(W_n - V_0)}{Mc^2}\psi(x) = 0, \quad (4.10)$$

která vede na sudé řešení ve formě

$$\psi_n(x) = C \cos \left(\sqrt{\frac{2m(W_n - V_0)}{Mc^2}} \cdot \frac{x}{\Lambda_C} \right). \quad (4.11)$$

Protože je řešení sudé, stačí obě větve navazovat jen v bodě $x = +\frac{L_n}{2}$ (v druhém je pak splněno automaticky). Tyto požadavky tvoří soustavu dvou lineárních rovnic s nulovými pravými stranami

$$Ae^{-\sqrt{-\frac{2W_n}{Mc^2}} \cdot \frac{L_n}{2\Lambda_C}} = C \cos \left(\sqrt{\frac{2(W_n - V_0)}{Mc^2}} \cdot \frac{L_n}{2\Lambda_C} \right) \quad (4.12a)$$

$$-\sqrt{-\frac{2W_n}{Mc^2}} Ae^{-\sqrt{-\frac{2W_n}{Mc^2}} \cdot \frac{L_n}{2\Lambda_C}} = -\sqrt{\frac{2(W_n - V_0)}{Mc^2}} C \sin \left(\sqrt{\frac{2(W_n - V_0)}{Mc^2}} \cdot \frac{L_n}{2\Lambda_C} \right) \quad (4.12b)$$

v proměnných A a C a s koeficienty parametricky závislými na W_n , M , L_n a V_0 , která má řešení, pokud je nulový determinant matice soustavy, neboli když

$$\tan \left(\sqrt{\frac{2(W_n - V_0)}{Mc^2}} \cdot \frac{L_n}{2\Lambda_C} \right) = \sqrt{\frac{-W_n}{W_n - V_0}}. \quad (4.13)$$

Pokud se argument zasubstituuje jako y a použije se už definované $y_{0(n)}$ ⁵, přechází podmínka řešitelnosti na

$$\tan y = \sqrt{\frac{y^2}{y_{0(n)}^2} - 1} = \sqrt{\frac{(-V_0)ML_n^2}{2\hbar^2} - 1} = \sqrt{\frac{(-V_0)}{2Mc^2} \cdot \frac{L_n^2}{\Lambda_C^2} - 1}. \quad (4.14)$$

Pro velká L_n bude, podle rozboru úlohy s neproměnnými parametry, y příslušné definovanému stavu ψ_n blízko $\frac{\pi}{2}$, kde tangentu lze odhadnout jako

$$\frac{1}{\tan y} = \cotan y \cong -1 \cdot \left(y - \frac{\pi}{2} \right) \Rightarrow \tan y \cong \frac{1}{\frac{\pi}{2} - y}. \quad (4.15)$$

Odmocnina se odhadne ještě snadněji z požadavku $L_\infty \gg \sqrt{\frac{2}{(-V_0)}} \cdot \Lambda_C y$ jako

$$\sqrt{\frac{(-V_0)}{2Mc^2} \cdot \frac{L_n^2}{\Lambda_C^2} - 1} \cong \frac{\sqrt{(-V_0)} \frac{L_n}{2Mc^2} \frac{1}{\Lambda_C}}{y}. \quad (4.16)$$

Porovnáním obou odhadů se z podmínky řešitelnosti stává rovnice

$$\frac{1}{\frac{\pi}{2} - y} = \frac{\sqrt{(-V_0)} \frac{L_n}{2Mc^2} \frac{1}{\Lambda_C}}{y} = \frac{y_{0(n)}}{y}, \quad (4.17)$$

ze které se snadno vyjádří kořen

$$y = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{y_{0(n)}}{1 + y_{0(n)}}. \quad (4.18)$$

Po návratu k substituci $y = \sqrt{\frac{2(W_n - V_0)}{Mc^2}} \cdot \frac{L}{2\Lambda_C}$, ze které plyne

⁵bylo definováno $y_0 = y_0(L)$, ale snadno se zobecní při $L \rightarrow L_n$ na $y_{0(n)} = y_{0(n)}(L_n)$

$$W_n = V_0 \left(1 - \frac{y^2}{y_{0(n)}^2} \right), \quad (4.19)$$

a dosazením přibližného řešení $y = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{y_{0(n)}}{1+y_{0(n)}}$ a $L_n = L_\infty + \frac{L_1-L_\infty}{n}$ vychází konečně

$$\begin{aligned} W_n &= V_0 \left(1 - \left(\frac{\frac{\pi}{2} \cdot \frac{y_{0(n)}}{1+y_{0(n)}}}{y_{0(n)}} \right)^2 \right) = V_0 \left(1 - \left(\frac{\pi}{2} \cdot \frac{1}{1+y_{0(n)}} \right)^2 \right) = \\ &= V_0 \left(1 - \frac{\pi^2}{4} \cdot \frac{1}{\left(1 + \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{(-V_0)}{Mc^2} \cdot \left(\frac{L_n}{\Lambda_C} \right)^2} \right)^2} \right) = \\ &= V_0 \left(1 - \frac{\pi^2}{4} \cdot \frac{1}{\left(1 + \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{(-V_0)}{Mc^2} \cdot \frac{L_\infty}{\Lambda_C} \cdot \left(1 + \frac{l-1}{n} \right)} \right)^2} \right), \end{aligned} \quad (4.20)$$

kde pro zkrácení zápisu bylo zavedeno $l \equiv \frac{L_1}{L_\infty} > 0$. Je snadné ověřit, že posloupnost je rostoucí. Odhady, které umožnily najít kořen $y = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{y_{0(n)}}{1+y_{0(n)}}$, jsou sice pro nízká n hrubé, ale pro vysoká začínají konvergovat k přesnému řešení, což je v duchu toho, co bude cílem najít pro cluster rydbergovské hmoty, který je zkoumán také právě spíše pro vysoká kvantová čísla.

Matematicky mnohem jednodušším modelem než jednorozměrná jáma konečné hloubky je jáma s nekonečnou hloubkou⁶, kde je Schrödingerova rovnice uvnitř jámy identická rovnici stojaté vlny s uzly na hranicích oblasti fyzikálního pohybu. Pokud má tato oblast velikost L jako v případě potenciálové jámy konečné hloubky, je lepší zvolit počátek souřadnic tak, aby odpovídala intervalu $x \in (0, L)$, protože odpadá nutnost řešit zvlášť sudá a lichá řešení a normalizované vlnové funkce mají univerzální tvar

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n x}{L} \quad (4.21)$$

pro $n \in \mathbb{N}$ a spektrum energií (které ale samozřejmě na volbě počátku souřadnic nezávisí) je

$$W_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ML^2} = \frac{1}{2} Mc^2 \left(\frac{\pi \Lambda_C}{L} \right)^2 n^2. \quad (4.22)$$

⁶někdy též Particle In Box – PIB

Pokud by platil stejný model jako pro případ s jámou konečné hloubky, tedy že by na každou excitaci jáma reagovala změnou vlastní velikosti, např. podle posloupnosti $L_n = \frac{L_1}{n}$, energetické spektrum tohoto systému by (po snadném dosazení) bylo

$$W_n = \frac{1}{2}Mc^2 \left(\frac{\pi\Lambda_C}{L} \right)^2 n^4. \quad (4.23)$$

Pro nekonečně hlubokou jámu lze kromě její šířky pracovat i s nulovou hladinou (jejím posunem); konkrétně zvolí-li $L_n = L_1 n^2$ (tedy stejně jako předpokládané škálování u rydbergovské hmoty), $V_{0(n)} = -\frac{2R}{n^2}$ a $L_1 = \pi a_0 = \pi \frac{\Lambda_C}{\alpha}$, pak je spektrum systému

$$W_n = -\frac{1}{2}Mc^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2} = -\frac{R}{n^2}, \quad (4.24)$$

tedy formálně identické spektru volného atomu vodíku. Konstrukt je sice velice umělý, aby takto vyšel, ale protože je vodíkové spektrum stejně dobře známo, není důvod si problém takto modelově nepřizpůsobit a nezkoumat další vlastnosti⁷. Pro ty účely by se ale problém musel nejdříve převést do dvou rozměrů, kde práce s potenciálovými jámami naráží na překážky, které jdou daleko za rámec této práce. Pro určení spektra clusteru v duchu metodiky popsané výše, tedy změnou parametrů systému podle kvantového stavu, byl tedy zvolen jiný postup.

4.2 Metoda LCAO; variační princip

Metoda LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals) je hojně užívána jak pro studium molekul, tak pevných látek. Spočívá v hledání vlnové funkce (stavu) systému složeného z více atomů jako lineární kombinace stavů izolovaných atomů, kde se optimalizují koeficienty lineární kombinace podle řady požadavků – například interakce pouze mezi sousedními atomy, minimalizace výsledné energie vůči volným parametrům, splnění Pauliho vylučovacího principu, různé požadavky symetrie apod.

Zároveň v kvantové mechanice existuje tzv. variační princip, který říká, že mezi energií E_{ground} základního stavu systému s hamiltoniánem H a libovolnou normalizovanou⁸ vlnovou funkcí ψ platí vztah

$$E_{\text{ground}} \leq \langle \psi | H | \psi \rangle; \quad (4.25)$$

rovnost nastává právě pro vlastní funkci systému, která základnímu stavu odpovídá (tj. splňující $H\psi = E_{\text{ground}}\psi$). V případě atomu vodíku jsou sice známa přesná řešení

⁷jednalo by se o podobný přístup jako např. u Kronig-Pennyho modelu

⁸a tedy samozřejmě i normalizovatelnou

Schrödingerovy rovnice $\psi_{n,l,m}$, tato řešení jsou ale poměrně komplikovaná, obzvláště s rostoucím n . Pokud se ale pro některý stav $\psi_{n,l,m}$ vyjde z jeho konkrétního průběhu, lze se pokusit nahradit jej jinou podobnou funkcí; ta ani nemusí formálně záviset na všech kvantových číslech n , l a m , nechť je tedy označena například $\tilde{\psi}_n$ a jako test "vhodné podobnosti" mezi $\psi_{n,l,m}$ a $\tilde{\psi}_n$ může být

$$\langle \tilde{\psi}_n | H | \tilde{\psi}_n \rangle \cong W_n. \quad (4.26)$$

4.3 Vodíkové vlnové funkce $\psi_{n,n-1,\pm(n-1)}$

Přesná vlnová funkce atomu vodíku $\psi_{n,l,m}$ závisí na třech kvantových číslech n , l a m ⁹. Ty po řadě zodpovídají za energii stavu, tvar orbitalu a jeho orientaci. Stavy s $l = 0$ jsou sféricky symetrické, zatímco stavy s $l_{\max;n} = n - 1$ jsou pro rostoucí n od sférické symetrie stále vzdálenější a kombinace $l = n - 1$ a $m_{\max;n} = \pm l = \pm(n - 1)$ je pro vysoká n stále lokalizovanější do ekvatoriální roviny. A jsou to právě tyto stavy, u kterých se předpokládá, že se budou vyskytovat v rydbergovské hmotě, která tvoří rovinné clustery.

Tato kapitola prozkoumá metodou LCAO cluster rydbergovské hmoty o velikost $V = 1$ (tedy celkem sedm uzlů) tvořeného atomy vodíku, o nichž se bude předpokládat, že jejich izolované vlnové funkce jsou ve stavech $\psi_{n,n-1,\pm(n-1)}$.

Obecné normalizované řešení Schrödingerovy rovnice pro atom vodíku ve sférických souřadnicích $r \in \langle 0, +\infty \rangle$, $\theta \in \langle 0, \pi \rangle$, $\varphi \in \langle 0, 2\pi \rangle$ je [24]

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^{2l+3} \cdot \frac{(n-1-l)!}{2n(n+l)!}} e^{-\frac{r}{na_0}} r^l L_{n-1-l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (4.27)$$

kde

$$Y_l^m \equiv \frac{e^{im\varphi}}{\sin^m \theta} \cdot \left(\frac{d}{d \cos \theta}\right)^{l-m} \sin^{2l} \theta \quad (4.28)$$

je (nenormalizovaná) kulová funkce a

$$L_{n-1-l}^{2l+1}(y) \equiv e^y y^{-(2l+1)} \cdot \frac{d^{n-1-l}}{dy^{n-1-l}} \left(e^{-y} y^{n+l} \right) \quad (4.29)$$

je tzv. zobecněný Laguerrův polynom. Pro vlnové funkce s $l = n - 1$ a $|m| = l = n - 1$ ihned plyne, že

⁹spin elektronu se zde ignoruje

$$\begin{aligned}
Y_{n-1}^{n-1} &\equiv \frac{e^{i(n-1)\varphi}}{\sin^{n-1} \theta} \cdot \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{(n-1)-(n-1)} \sin^{2(n-1)} \theta = \\
&= \frac{e^{i(n-1)\varphi}}{\sin^{n-1} \theta} \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^0 \sin^{2n-2} \theta = e^{i(n-1)\varphi} \sin^{n-1} \theta
\end{aligned} \tag{4.30}$$

a

$$\begin{aligned}
L_{n-1-(n-1)}^{2(n-1)+1}(y) &\equiv e^y y^{-(2(n-1)+1)} \cdot \frac{d^{n-1-(n-1)}}{dy^{n-1-(n-1)}} \left(e^{-y} y^{n+(n-1)} \right) = \\
&= e^y y^{-2n+1} \cdot \frac{d^0}{dy^0} \left(e^{-y} y^{n+(n-1)} \right) = \\
&= e^y y^{-2n+1} e^{-y} y^{n+(n-1)} = 1,
\end{aligned} \tag{4.31}$$

tedy dojde k významnému zjednodušení. Dosazením do vlnové celkové funkce je tedy

$$\begin{aligned}
\psi_{n,n-1,|n-1|}(r, \theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi n} \cdot \left(\frac{2}{na_0} \right)^{2n+1} \cdot \frac{1}{2^{2n}((n-1)!)^2}} \times \\
&\times r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}} \sin^{n-1} \theta e^{i(n-1)\varphi}.
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Je vhodné několik prvních členů této posloupnosti funkcí vyjmenovat¹⁰:

- $n = 1 \Rightarrow \psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi \cdot a_0^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$
- $n = 2 \Rightarrow \psi_{2,1,1} = \frac{1}{\sqrt{2^6 \cdot \pi \cdot a_0^5}} \cdot r e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot \sin \theta \cdot e^{-i\varphi}$
- $n = 3 \Rightarrow \psi_{3,2,2} = \frac{1}{\sqrt{2^{12} \cdot 3^8 \cdot \pi \cdot a_0^7}} \cdot r^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \cdot \sin^2 \theta \cdot e^{-i2\varphi}$
- $n = 4 \Rightarrow \psi_{4,3,3} = \frac{1}{\sqrt{2^{22} \cdot 3^{12} \cdot \pi \cdot a_0^9}} \cdot r^3 e^{-\frac{r}{4a_0}} \cdot \sin^3 \theta \cdot e^{-i3\varphi}$

Funkce jako celek je normalizovaná, ale na jedničku jsou normalizované i dílčí funkce, které lze označit např. jako $R(r)$, $\Theta(\theta)$ a $\Phi(\varphi)$:

¹⁰ mohou být i notoricky známé

$$R_n(r) \equiv C_n^{(r)} r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}} = \left(\frac{2}{na_0} \right)^n \sqrt{\frac{2}{na_0}} \cdot \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \cdot r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}} \quad (4.33a)$$

$$\int_0^{+\infty} |R_n|^2(r) r^2 dr = 1 \quad (4.33b)$$

$$\Theta_n(\theta) \equiv C_n^{(\theta)} \sin^{n-1} \theta = \frac{1}{2^n(n-1)!} \cdot \sqrt{\frac{(2n)!}{n}} \cdot \sin^{n-1} \theta \quad (4.33c)$$

$$\int_0^\pi |\Theta_n|^2(\theta) \sin \theta d\theta = 1 \quad (4.33d)$$

$$\Phi_n(\varphi) = C_n^{(\phi)} e^{-i(n-1)\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-i(n-1)\varphi} \quad (4.33e)$$

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_n(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \quad (4.33f)$$

4.4 Aproximace vodíkových funkcí $\psi_{n,n-1,\pm(n-1)}$ funkcí $\tilde{\psi}_n$

Nabízí se tato aproximace – protože se funkce $\psi_{n,n-1,-(n-1)}$ s rostoucím n stále více lokalizuje do roviny a v ní do určitého mezikruží, lze ji nahradit funkcí $\tilde{\psi}_n$, která bude konstantní (jednotková až na normalizační konstantu) v oblasti lokalizace a nulová jinde. K tomu je samozřejmě potřeba oblast lokalizace nejprve nějak vhodně vymezit.

Je vhodné začít s funkcí $\Theta_n(\theta)$, pro kterou je rozbor snadnější. Její definiční obor je $\langle 0, \pi \rangle$ a na něm nabývá pro $n \geq 2$ maxima v bodě $\theta = \frac{\pi}{2}$. Toto maximum je

$$\Theta_n^{\max} = \Theta_n\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2^n(n-1)!} \cdot \sqrt{\frac{(2n)!}{n}}. \quad (4.34)$$

Funkce $\Theta_n(\theta)$ okolo maxima $\frac{\pi}{2}$ nápadně připomínají Gaussovu křivku (jak je názorně vidět v Obr. 4.2), nabízí se je tedy k ní nějak připodobnit. Derivace k funkci $\sin^{n-1} \theta$ až do čtvrtého řádu jsou

$$\left(\frac{d}{d\theta} \right)^{(0)} \sin^{n-1} \theta = \sin^{n-1} \theta \quad (4.35a)$$

$$\left(\frac{d}{d\theta} \right)^{(1)} \sin^{n-1} \theta = (n-1) \sin^{n-2} \theta \cos \theta \quad (4.35b)$$

$$\left(\frac{d}{d\theta} \right)^{(2)} \sin^{n-1} \theta = (n-1) \sin^{n-3} \theta ((n-2) \cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \quad (4.35c)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{d\theta}\right)^{(3)} \sin^{n-1} \theta &= (n-1) \sin^{n-4} \theta \cos \theta \times \\ &\times ((n-2)(n-3) \cos^2 \theta - (3n-5) \sin^2 \theta) \end{aligned} \quad (4.35d)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{d\theta}\right)^{(4)} \sin^{n-1} \theta &= (n-1) (\sin^{n-5} \theta ((n-4) \cos^2 \theta - \sin^2 \theta)) \times \\ &\times ((n-2)(n-3) \cos^2 \theta - (3n-5) \sin^2 \theta) \\ &- (n-1) \sin^{n-4} \theta \cos \theta \cdot 2 \sin \theta \cos \theta ((n-2)(n-3) + (3n-5)) \end{aligned} \quad (4.35e)$$

a jejich vyčíslení v bodě $\frac{\pi}{2}$ pak

$$\left(\frac{d}{d\theta}\right)^{(0)} \sin^{n-1} \theta|_{\theta=\frac{\pi}{2}} = 1 \quad (4.36a)$$

$$\left(\frac{d}{d\theta}\right)^{(1)} \sin^{n-1} \theta|_{\theta=\frac{\pi}{2}} = 0 \quad (4.36b)$$

$$\left(\frac{d}{d\theta}\right)^{(2)} \sin^{n-1} \theta|_{\theta=\frac{\pi}{2}} = -(n-1) \quad (4.36c)$$

$$\left(\frac{d}{d\theta}\right)^{(3)} \sin^{n-1} \theta|_{\theta=\frac{\pi}{2}} = 0 \quad (4.36d)$$

$$\left(\frac{d}{d\theta}\right)^{(4)} \sin^{n-1} \theta|_{\theta=\frac{\pi}{2}} = (3n-5)(n-1), \quad (4.36e)$$

a její Taylorův rozvoj v daném bodě do čtvrtého řádu tedy je

$$T_{4, \sin^{n-1} \theta, \frac{\pi}{2}}(\theta) = 1 - \frac{n-1}{2} \left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)^2 + \frac{(3n-5)(n-1)}{24} \left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)^4. \quad (4.37)$$

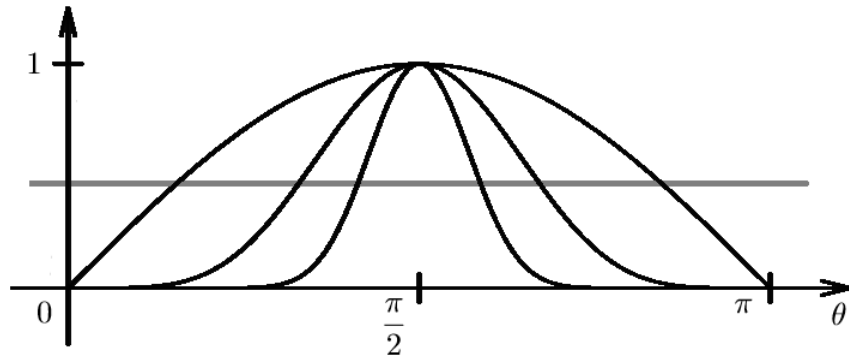
Vhodně zvolená Gaussova funkce

$$G_n^{(\theta)}(\theta) = e^{-\frac{n-1}{2}(\theta-\frac{\pi}{2})^2} = e^{-\frac{(\theta-\frac{\pi}{2})^2}{\frac{2}{n-1}}} = e^{-\frac{(\theta-\frac{\pi}{2})^2}{2\left(\frac{1}{\sqrt{n-1}}\right)^2}}, \quad (4.38)$$

má svůj rozvoj okolo $\frac{\pi}{2}$ (také do čtvrtého řádu) dán jako

$$T_{4, e^{-\frac{n-1}{2}(\theta-\frac{\pi}{2})^2}, \frac{\pi}{2}}(\theta) = 1 - \frac{n-1}{2} \left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)^2 + \frac{(3n-3)(n-1)}{24} \left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)^4, \quad (4.39)$$

přičemž rozdíl oproti výše uvedenému Tayloru klesá s rostoucím n . Samozřejmě nelze říct, že se k sobě funkce limitně blíží, neboť co se správi ve čtvrtém řádu, se rozhodí



Obr. 4.2: Funkce $\sin \theta$, $\sin^5 \theta$ a $\sin^{20} \theta$ (v pořadí šířek) v intervalu $\langle 0, \pi \rangle$. Vyšší mocniny nápadně připomínají Gaussovu funkci a stále více se lokalizují v ekvatoriální rovině $\theta = \frac{\pi}{2}$. Pološířka křivek se odečítá mezi průsečíky s přímkou v šedivé barvě.

v řádech dalších, protože obě řady konvergují k odlišným funkcím. Analýza se ale snaží o posouzení lokalizovanosti funkce okolo $\frac{\pi}{2}$, k čemuž rozvoje do čtvrtého řádu dobře poslouží. Vizuálně je zřejmé, že k rostoucí lokalizovanosti s vyššími n opravdu dochází a nabízí se ji odhadnout jako pološířku Gaussovy křivky $G_n^{(\theta)}(\theta)$. Každá Gaussova křivka tvaru $e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$ má pološířku rovnu $\sqrt{8 \ln 2} \cdot \sigma$, tedy v případě zvoleného $G_n^{(\theta)}(\theta)$ bude

$$\Delta_n^{(\theta)} \equiv \text{FWHM}_{G_n^{(\theta)}} = \frac{\sqrt{8 \ln 2}}{\sqrt{n-1}} \cong \sqrt{\frac{8 \ln 2}{n}}, \quad (4.40)$$

kde se předpokládá, že odhad pro vysoká n bude uspokojivý. Polovina z pološířky je $\frac{1}{2} \cdot \sqrt{\frac{8 \ln 2}{n}} = \sqrt{\frac{2 \ln 2}{n}}$ a tedy lze uzavřít, že se funkce $\Theta_n(\theta)$ nahradí¹¹ funkcí

$$\tilde{\Theta}_n(\theta) = \begin{cases} 1, & \theta \in \left(\frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{2 \ln 2}{n}}, \frac{\pi}{2} + \sqrt{\frac{2 \ln 2}{n}} \right) \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}, \quad (4.41)$$

kde ovšem ještě není uvážena příslušná normalizace.

Funkce $R_n(r)$ je pro podobnou analýzu náročnější, protože lokalizovanost jako taková neklesá, ale naopak roste, jak je patrné z několika zvolených funkcí při znázornění. Absolutní lokalizovanost ale, jak se ukáže, nutná není. Nejprve je třeba určit maximum funkce (které je jako u $\Theta_n(\theta)$ pro daný definiční obor jen jedno). Z vyšetření průběhu funkce

¹¹nejhrubší je nahrazení pro $n = 1$, neboť $\Theta_1(\theta)$ je dokonce konstantní funkce a pološířku nemá definovanou, aproximace ale dobře funguje pro vyšší n , což je podstatné

$$R_n(r) \equiv C_n^{(r)} r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}} = \left(\frac{2}{na_0} \right)^n \sqrt{\frac{2}{na_0}} \cdot \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \cdot r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}} \quad (4.42)$$

snadno plyne, že pro každé n se maximum nachází v jiném místě, v kontrastu s funkcemi $\Theta_n(\theta)$. Aby bylo v jejich posloupnosti možné porovnat chování okolo maxima, je potřeba je transformovat tak, aby se vyskytovaly v jedné oblasti. Jak na to, napoví znalost vlastností atomu vodíku v Bohrově modelu a rydbergovské hmoty, které svoje velikosti škálují jako $a_0 n^2$ – v případě obou dvou je výraz roven poloměru (orbit elektronů)¹². Zavede-li se tedy nová proměnná $\rho \equiv \frac{r}{a_0 n^2}$, přejde výraz $r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}}$ na

$$(\rho a_0 n^2)^{n-1} e^{-\frac{\rho a_0 n^2}{na_0}} = a_0^{n-1} n^{2(n-1)} \rho^{n-1} e^{-n\rho}, \quad (4.43)$$

jehož maxima jsou v bodech

$$\rho_n^{\max} = \frac{n-1}{n} \quad (4.44)$$

a maxima mají hodnoty

$$R_n(\rho_n^{\max}) \left(\frac{a_0 n(n-1)}{e} \right)^{n-1}; \quad (4.45)$$

pokud se těmito maximy podělí funkce v proměnné ρ , vyjde

$$R_n(\rho) = \left(\frac{en}{n-1} \right)^{n-1} \rho^{n-1} e^{-n\rho} \quad (4.46)$$

a všechny se zobrazí do stejné oblasti a se stejným rozsahem, což usnadňuje porovnání – situaci znázorňuje 4.3. Z analýzy byla vypuštěna normalizační konstanta, která na odhadnutí lokalizovanosti funkce nemá vliv.

Taylorův rozvoj do druhého řádu¹³ bude

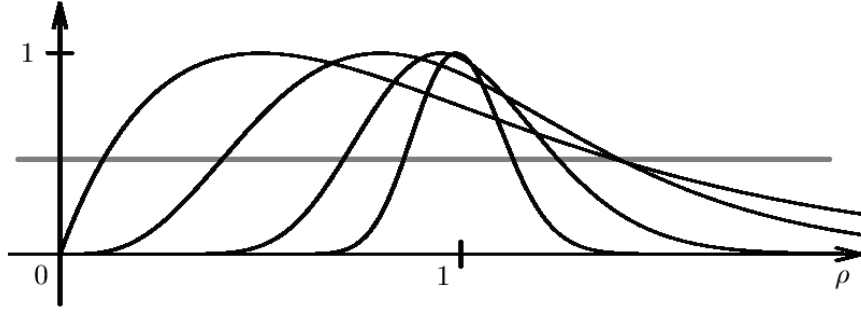
$$T_{2, \left(\frac{en}{n-1} \right)^{n-1} \rho^{n-1} e^{-n\rho}, \frac{n-1}{n}}(\rho) = 1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{n^2}{n-1} \left(\rho - \frac{n-1}{n} \right)^2, \quad (4.47)$$

který je do druhého řádu shodný s rozvojem funkce

$$G_n^{(\rho)}(\rho) = e^{-\frac{\left(\rho - \frac{n-1}{n} \right)^2}{\frac{2(n-1)}{n^2}}}, \quad (4.48)$$

¹²vlnová funkce podle Schrödingerovy rovnice v těchto bodech nemá maxima, ale soustředí se v jejich blízkostech

¹³faktor $\left(\frac{en}{n-1} \right)^{n-1}$ byl ponechán, aby měly všechny funkce maximum rovné jedné a tedy i univerzální začátek Taylorova rozvoje, který se pak snáze bude připodobňovat ke Gaussově křivce



Obr. 4.3: Funkce $\left(\frac{en}{n-1}\right)^{n-1} \rho^{n-1} e^{-n\rho}$. Zobrazeny jsou (zleva doprava podle polohy maxima) pro $n = 2$, $n = 5$, $n = 20$ a $n = 80$. Podle n konverguje maximum funkce k bodu $\rho = 1$ a členy také více připomínají Gaussovu funkci. Podle průsečíků s šedivou přímkou se odečítají pološířky.

odkud snadno plyne

$$\Delta_n^{(\rho)} \equiv \text{FWHM}_{G_n^{(\rho)}} = \sqrt{8 \ln 2} \cdot \sqrt{\frac{n-1}{n^2}} = \sqrt{8 \ln 2} \cdot \frac{\sqrt{n-1}}{n}, \quad (4.49)$$

tedy ve stejném duchu jako v případě $\Theta_n(\theta)$ lze odhadnout oblast lokalizace pomocí pološířky gaussovske funkce jako

$$\rho \in \left(\frac{n-1}{n} - \sqrt{2 \ln 2} \cdot \frac{\sqrt{n-1}}{n}, \frac{n-1}{n} + \sqrt{2 \ln 2} \cdot \frac{\sqrt{n-1}}{n} \right). \quad (4.50)$$

Absolutní lokalizovanost se tedy zhoršuje, ale v poměru k $a_0 n^2$ je pro rostoucí n stále lepší, což stačí. Návrat k původní proměnné $r = a_0 n^2 \rho$ je snadný a vychází $\Delta_n^{(r)} = \sqrt{8 \ln 2} \cdot n \sqrt{n-1} a_0$ a

$$r \in \left(n(n-1)a_0 - \sqrt{2 \ln 2} \cdot n \sqrt{n-1} a_0, n(n-1)a_0 + \sqrt{2 \ln 2} \cdot n \sqrt{n-1} a_0 \right), \quad (4.51)$$

což lze pro vysoká n odhadnout jako

$$\begin{aligned} r \in \left(n^2 a_0 - \sqrt{2 \ln 2} \cdot n^{\frac{3}{2}} a_0, n^2 a_0 + \sqrt{2 \ln 2} \cdot n^{\frac{3}{2}} a_0 \right) = \\ = \left(r_n - \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}, r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2} \right), \end{aligned} \quad (4.52)$$

takže se konečně může zavést funkce

$$\tilde{R}_n(r) = \begin{cases} 1, r \in \left(r_n - \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}, r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}\right) \\ 0 \text{ jinak} \end{cases}, \quad (4.53)$$

opět zatím bez vyšetření normalizovanosti. Nechť je ještě označeno $\frac{\Delta_n^{(r)}}{2} \equiv \sqrt{2 \ln 2} \cdot n\sqrt{n-1}a_0$.

Konečně se funkce $\Phi_n(\varphi)$ nahradí konstantou v celém definičním oboru, tedy

$$\tilde{\Phi}_n(\varphi) = 1, \varphi \in \langle 0, 2\pi \rangle. \quad (4.54)$$

4.5 Normalizace funkcí $\tilde{\psi}_n$ a test aproximace

U zkonstruovaných funkcí je názornější, jsou-li normalizovány jako součin tvořící výslednou funkci a ne jedna po druhé. Výsledná vlnová funkce $\tilde{\psi}_n$ je dána jako součin (4.41), (4.53), (4.54), tedy

$$\tilde{\psi}_n(r, \theta) = \begin{cases} C, (r, \theta) \in \left\langle r_n - \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}, r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2} \right\rangle \times \left\langle \frac{\pi}{2} - \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}, \frac{\pi}{2} + \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \right\rangle \\ 0 \text{ jinak} \end{cases}, \quad (4.55)$$

kde C je normalizační konstanta, kterou lze snadno najít z podmínky

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\psi}_n^*(r, \theta) \tilde{\psi}_n(r, \theta) dV = \int_{r_n - \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}}^{r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}} \int_{\frac{\pi}{2} - \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}}^{\frac{\pi}{2} + \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}} \int_0^{2\pi} |C|^2 r^2 \sin \theta d\varphi d\theta dr = \\ &= |C|^2 \int_{r_n - \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}}^{r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}} r^2 dr \cdot \int_{\frac{\pi}{2} - \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}}^{\frac{\pi}{2} + \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}} \sin \theta d\theta \cdot \int_0^{2\pi} 1 d\varphi = \\ &= |C|^2 \cdot \left[\frac{r^3}{3} \right]_{r_n - \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}}^{r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}} \cdot [-\cos \theta]_{\frac{\pi}{2} - \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}}^{\frac{\pi}{2} + \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}} \cdot 2\pi = \\ &= \frac{2\pi}{3} \cdot |C|^2 \cdot \left(2 \cdot 3r_n^2 \frac{\Delta_n^{(r)}}{2} + 2 \cdot \left(\frac{\Delta_n^{(r)}}{2} \right)^3 \right) \cdot 2 \cdot \sin \frac{\pi}{2} \sin \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} = \\ &= 4\pi \cdot |C|^2 \cdot r_n^2 \cdot \Delta_n^{(r)} \cdot \left(1 + \frac{\left(\Delta_n^{(r)} \right)^2}{12r_n^2} \right) \cdot \sin \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \cong \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\cong \left[\Delta_n^{(\theta)} = \sqrt{\frac{8 \ln 2}{n}} \ll \frac{\pi}{2} \Rightarrow \sin \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \cong \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \right] \cong \\
&\cong 2\pi \cdot |C|^2 \cdot r_n^2 \cdot \Delta_n^{(r)} \cdot \Delta_n^{(\theta)} \cdot \left(1 + \frac{(\Delta_n^{(r)})^2}{12r_n^2} \right) = \\
&= 2\pi \cdot |C|^2 \cdot a_0^3 n^3 (n-1)^2 \cdot 8 \ln 2 \cdot \left(1 + \frac{2 \ln 2}{3(n-1)} \right)
\end{aligned} \tag{4.56}$$

odkud

$$\begin{aligned}
|C|^2 &= \frac{1}{2\pi \cdot a_0^3 n^3 (n-1)^2 \cdot 8 \ln 2 \cdot \left(1 + \frac{2 \ln 2}{3(n-1)} \right)} \cong \\
&\cong \frac{1}{16\pi \ln 2 \cdot a_0^3 \cdot n^5}
\end{aligned} \tag{4.57}$$

tj.

$$C \cong \frac{1}{\sqrt{16\pi \ln 2} \cdot a_0^{\frac{3}{2}} \cdot n^{\frac{5}{2}}}. \tag{4.58}$$

Konečně tedy je normalizovaná funkce dána jako

$$\begin{aligned}
&\tilde{\psi}_{n,n-1,-(n-1)}(r, \theta, \varphi) = \tilde{\psi}_n(r, \theta) = \\
&= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{16\pi \ln 2} \cdot a_0^{\frac{3}{2}} \cdot n^{\frac{5}{2}}}, & (r, \theta) \in M_{r,\theta} \\ 0 & \text{jinak} \end{cases},
\end{aligned} \tag{4.59}$$

kde

$$\begin{aligned}
M_{r,\theta} &\equiv \left\langle a_0 n^2 - \sqrt{2 \ln 2} \cdot n^{\frac{3}{2}} a_0, a_0 n^2 + \sqrt{2 \ln 2} \cdot n^{\frac{3}{2}} a_0 \right\rangle \times \\
&\times \left\langle \frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{2 \ln 2}{n}}, \frac{\pi}{2} + \sqrt{\frac{2 \ln 2}{n}} \right\rangle
\end{aligned} \tag{4.60}$$

Sada funkcí aproximuje původní přesné vlnové funkce stále přesněji s rostoucím n a o vysoká n jde u clusterů rydbergovské hmoty především. Už zmíněným testem, jak posoudit vhodnost náhrady vlnové funkce jinou, v tomto případě $\tilde{\psi}_n$, je výraz

$$\langle \tilde{\psi}_n | H | \tilde{\psi}_n \rangle, \tag{4.61}$$

který pro přesné řešení atomu vodíku vychází $W_n = -\frac{R_\infty}{n^2}$ a pro jakékoliv jiné $\tilde{W}_n \geq W_n$. Hamiltonián atomu vodíku má ale kromě potenciálové části i část kinetickou úměrnou druhé derivaci¹⁴ vlnové funkce, která je v případě po částech konstantní funkce $\tilde{\psi}_n$ nulová. Naštěstí viriálový teorém pro potenciál typu $\frac{1}{r}$ praví, že

$$\langle \tilde{\psi}_n | W_k | \tilde{\psi}_n \rangle = -\frac{1}{2} \langle \tilde{\psi}_n | W_p | \tilde{\psi}_n \rangle \Rightarrow \langle \tilde{\psi}_n | W | \tilde{\psi}_n \rangle = \langle \tilde{\psi}_n | \frac{W_p}{2} | \tilde{\psi}_n \rangle, \quad (4.62)$$

a lze tedy vypočítat

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\psi}_n | H | \tilde{\psi}_n \rangle &= \langle \tilde{\psi}_n | \frac{W_p}{2} | \tilde{\psi}_n \rangle = \langle \tilde{\psi}_n | -\frac{\alpha \hbar c}{2r} | \tilde{\psi}_n \rangle = -\frac{1}{2} m c^2 \alpha \cdot \Lambda_C \cdot \langle \tilde{\psi}_n | \frac{1}{r} | \tilde{\psi}_n \rangle = \\ &= -\frac{1}{2} m c^2 \alpha \cdot \Lambda_C \cdot \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{|\tilde{\psi}_n|^2}{r} r^2 \sin \theta d\varphi d\theta dr = \\ &= -\frac{1}{2} m c^2 \alpha \cdot \Lambda_C \cdot |C|^2 \cdot \int_{r_n - \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}}^{r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}} r dr \cdot \int_{\frac{\pi}{2} - \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}}^{\frac{\pi}{2} + \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}} \sin \theta d\theta \cdot \int_0^{2\pi} 1 d\varphi = \\ &= -\frac{1}{2} m c^2 \alpha \cdot \Lambda_C \cdot |C|^2 \cdot \left[\frac{r^2}{2} \right]_{r_n - \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}}^{r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}} \cdot [\cos \theta]_{\frac{\pi}{2} + \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}}^{\frac{\pi}{2} - \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}} \cdot 2\pi = \\ &= -\frac{1}{2} m c^2 \alpha \cdot \Lambda_C \cdot |C|^2 \cdot \pi \cdot 2r_n \cdot \Delta_n^{(r)} \cdot 2 \cdot \sin \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \cong \\ &\cong -\frac{1}{2} m c^2 \alpha \cdot \Lambda_C \cdot |C|^2 \cdot \pi \cdot 2a_0 n^2 \cdot \sqrt{8 \ln 2} \cdot n^{\frac{3}{2}} a_0 \cdot \sqrt{\frac{8 \ln 2}{n}} = \\ &= -\frac{1}{2} m c^2 \alpha \cdot \Lambda_C \cdot |C|^2 \cdot 2\pi \cdot 8 \ln 2 \cdot a_0^2 \cdot n^3 = \\ &= -\frac{1}{2} m c^2 \alpha \cdot \Lambda_C \cdot \frac{1}{16\pi \ln 2 \cdot a_0^3 \cdot n^5} \cdot 2\pi \cdot 8 \ln 2 \cdot a_0^2 \cdot n^3 = \\ &= -\frac{1}{2} m c^2 \alpha \cdot \Lambda_C \cdot \frac{1}{a_0 \cdot n^2} = -\frac{1}{2} m c^2 \alpha^2 \cdot \frac{1}{n^2}, \end{aligned} \quad (4.63)$$

což se přesnému rydbergovskému spektru rovná dokonce identicky. To není v rozporu s variačním principem, protože bylo použito několikrát odhadu $n-1 \cong n$ pro vysoká n a také viriálové věty. Rovnost ale nastává, lze tedy v daném rámci považovat náhradní vlnovou funkci $\tilde{\psi}_n$ za uspokojivou.

¹⁴přesněji Laplaceově operátoru

Stejně přesný výsledek by vyšel i tehdy, pokud by byl potenciál $W_p(r) = -\frac{\alpha\hbar c}{r}$ linearizován, tj. hyperbola v intervalu $\left(a_0n^2 - \sqrt{2\ln 2}n^{\frac{3}{2}}a_0, a_0n^2 + \sqrt{2\ln 2}n^{\frac{3}{2}}a_0\right)$ nahrazena přímkou, danou Taylorovým rozvojem hyperboly okolo bodu a_0n^2

$$T_{1,\frac{1}{r},a_0n^2} = -\frac{r - 2a_0n^2}{(a_0n^2)^2}. \quad (4.64)$$

Vzhledem k tomu, že oblast, kde je $\tilde{\psi}_n$ nenulová, je s rostoucím n od zdroje coulombického potenciálu stále dál, nabízí se zkusit potenciál nahradit prostou konstantou rovnou hodnotě potenciálu ve středu této oblasti, tj.

$$W_p(r) \cong -\frac{\alpha\hbar c}{a_0n^2} = -\frac{\alpha^2mc^2}{n^2}. \quad (4.65)$$

Výsledek $-\frac{R_\infty}{n^2}$ je opět zaručen.

4.6 LCAO pro cluster se sedmi atomy vodíku; Roothaanova rovnice

Nechť je nyní dán atomárně-vodíkový cluster rydbergovské hmoty o velikosti $V = 1$, tj. sedm atomů vodíku v hexagonálním uspořádání jednoho uprostřed a šesti okolo tak, že jejich vzájemná vzdálenost je jen málo odlišná od $2a_0n^2$, což odpovídá těsnému uspořádání při rovinných kruhových orbitách elektronů o poloměrech přibližně právě a_0n^2 . Všechny elektronické stavy všech atomů jsou stejné (n). Prostřední atom je v takto těsném kontaktu s ostatními šesti, každý z šesti obvodových pak se třemi – prostředním a dvěma "obvodovými" sousedy. Každý ze sedmi atomů zvlášť nechť má vlnovou funkci $\tilde{\psi}_n$ nalezenou v předchozí sekci, a tedy i energii $-\frac{R_\infty}{n^2}$. Každá z vlnových funkcí je ale vyčíslována okolo různého počátku souřadnic daném polohou vodíkového jádra – nechť je tato poloha označena jako $\vec{R}_i, i = 0, 1, \dots, 6$, kde prostřední atom je indexován nulou a obvodové dalšími čísly; dále dílčí vlnové funkce každého z atomů nesou označení $\tilde{\psi}_{i(n)}$ ¹⁵.

Hamiltonián, vlnové funkce a energie pro izolované atomy bez interakce s ostatními se bude značit vlnovkou, pro systém jako celek pak bude platit symbolika bez vlnovek. Nechť je zvolen nějaký (i -tý) atom. Jeho hamiltonián zvlášť (pokud by byl izolovaný od ostatních) je

¹⁵od sebe navzájem se liší jen posunutím: $\tilde{\psi}_{i(n)} = \tilde{\psi}_n(\vec{R}_i)$

$$\tilde{H}_i = -\frac{1}{2}mc^2\Lambda_C^2\Delta - mc^2\alpha\Lambda_C\frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}_i|} = -mc^2\Lambda_C^2\left(\frac{1}{2}\Delta + \frac{\alpha}{\Lambda_C}\cdot\frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}_i|}\right), \quad (4.66)$$

kde Δ znamená Laplaceův operátor. Takový hamiltonián tedy v klidové soustavě atomu vodíku určuje pohyb elektronu v poli jádra o poloze $\vec{R}_i$, který není ovlivněn žádnými dalšími jádry. Řešením stacionární Schrödingerovy rovnice $\tilde{H}_i\tilde{\psi}_{i(n)} = \tilde{W}_n\tilde{\psi}_{i(n)}$ jsou samozřejmě rydbergovské energie $-\frac{R_\infty}{n^2}$.

Pokud bude daný elektron vystaven působení všech jader, přejde výše uvedený hamiltonián na

$$H = -mc^2\Lambda_C^2\left(\frac{1}{2}\Delta + \frac{\alpha}{\Lambda_C}\cdot\sum_{k=0}^6\frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}_k|}\right); \quad (4.67)$$

tento hamiltonián je univerzální pro všechny elektrony – jejich vzájemná coulombická interakce není uvažována a jiným způsobem nejsou indexovány, tedy uvedený operátor může působit na všechny ($H_n = H$).

Výsledná vlnová funkce systému se předpokládá ve formě lineární kombinace dílčích vlnových funkcí, tedy

$$\psi_n = \sum_{i=0}^6 c_i \tilde{\psi}_{i(n)}, \quad (4.68)$$

kde c_i jsou koeficienty tohoto rozvoje. Je názornější v tomto případě používat bra-ketový formalismus, tedy

$$|\psi_n\rangle = \sum_{i=0}^6 c_i |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle. \quad (4.69)$$

Pokud na tuto vlnovou funkci zapůsobí uvedený celkový hamiltonián a pokud se řeší rovnice $H|\psi_n\rangle = W_n|\psi_n\rangle$, kde W_n je tedy celková energie systému, plyne

$$\begin{aligned} H\psi_n &= H\left(\sum_{i=0}^6 c_i |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle\right) = -mc^2\Lambda_C^2\left(\frac{1}{2}\Delta + \frac{\alpha}{\Lambda_C}\cdot\sum_{k=0}^6\frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}_k|}\right)\left(\sum_{i=1}^6 c_i |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle\right) = \\ &= -mc^2\Lambda_C^2\left(\left(\frac{1}{2}\Delta + \frac{\alpha}{\Lambda_C}\cdot\frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}_i|}\right) + \frac{\alpha}{\Lambda_C}\cdot\sum_{k=0, \neq i}^6\frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}_k|}\right)\left(\sum_{i=1}^6 c_i |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle\right) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\tilde{H}_i - mc^2 \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot \sum_{k=0, \neq i}^6 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_k|} \right) \left(\sum_{i=1}^6 c_i |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle \right) = \\
&= \sum_{i=1}^6 c_i \left(\tilde{H}_i - mc^2 \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot \sum_{k=0, \neq i}^6 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_k|} \right) |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle = \\
&= \sum_{i=1}^6 c_i \left(\tilde{W}_n - mc^2 \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot \sum_{k=0, \neq i}^6 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_k|} \right) |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle = \\
&= W_n \left(\sum_{i=0}^6 c_i |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle \right) = \sum_{i=0}^6 c_i W_n |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle, \tag{4.70}
\end{aligned}$$

kde poslední řádek představuje pravou stranu Schrödingerovy rovnice, nikoliv pokračování úprav z řádků předchozích. Tato rovnice lze anulovat na

$$0 = \sum_{i=0}^6 c_i \left(\left(\tilde{W}_n - W_n \right) - mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot \sum_{k=0, k \neq i}^6 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_k|} \right) |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle \tag{4.71}$$

a skalárně ji zleva vynásobit bra-vektorem $\langle \tilde{\psi}_{j(n)} |$ pro každé $j = 0, 1, \dots, 6$ – potom

$$0 = \sum_{i=0}^6 c_i \langle \tilde{\psi}_{j(n)} | \left(\left(\tilde{W}_n - W_n \right) - mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot \sum_{k=0, k \neq i}^6 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_k|} \right) |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle. \tag{4.72}$$

Označí-li se celý maticový element jako M_{ji} , potom lze definovat matici M (v tomto případě o rozměru sedm krát sedm), jejíž prvky jsou právě M_{ji} . Prostým dosazením (substitucí) pak vyplývá

$$\sum_{i=0}^6 M_{ji} c_i = 0, \tag{4.73}$$

což je sedm rovnic pro různá j , které lze zřejmě úsporně napsat v maticovém tvaru, zavede-li se $\vec{c} \equiv (c_0, c_1, \dots, c_6)^T$:

$$M\vec{c} = 0 \tag{4.74}$$

Jedná se tedy o soustavu lineárních rovnic pro koeficienty c_i s nulovou pravou stranou, a tedy má řešení právě tehdy, když je determinant matice M nulový, což úlohu transformuje na hledání vlastních čísel a vlastních vektorů. Pozor – výsledné energie soustavy W_n nejsou vlastními čísly matice M – ty je z nich teprve potřeba vyjádřit.

Rekapitulace: řeší se Schrödingerova rovnice $H|\psi_n\rangle = W_n|\psi_n\rangle$ za podmínek $|\psi_n\rangle = \sum_{i=0}^6 c_i |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle$ a $\tilde{H}_i |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle = \tilde{W}_n |\tilde{\psi}_{i(n)}\rangle$, kde symbolicky $H = \sum_{j=0}^6 \tilde{H}_j - 6(-mc^2 \Lambda_C^2 \cdot \frac{1}{2} \Delta)$, tedy každý H_j je přítomen v celkovém H , ten však není jejich součtem. Bez jakýchkoli jiných přiblížení se úloha dá převést na soustavu lineárních rovnic pro koeficienty c_i , kde prvky matice soustavy jsou dány jako

$$M_{ji} = \langle \tilde{\psi}_{j(n)} | \left((\tilde{W}_n - W_n) - mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot \sum_{k=0, k \neq i}^6 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_k|} \right) | \tilde{\psi}_{i(n)} \rangle, \quad (4.75)$$

kde W_n je energie celého systému, která je cílem řešení a která závisí na ostatních výrazech v M_{ji} a také na vlastních číslech matice. Výsledná rovnice v tomto přístupu je někdy označována jako Roothaanova [25].

Rozvoj determinantu matice N -tého řádu obecně vede na polynomiální rovnici N -tého stupně, kterou v plné obecnosti v závislosti na parametrech bývá nesnadné – ne-li nemožné – řešit. Je samozřejmě vhodné před samotným řešením úlohy na vlastní vektory a vlastní čísla aplikovat na prvky matice M požadavky symetrie nebo aproximací, aby se M co nejvíce zjednodušila – některé její prvky budou nulové, řada nenulových bude navzájem shodná. Z konstrukce M_{ji} plyne, že matice je symetrická, tedy $M_{ji} = M_{ij}$, a interakce se uvažuje jen mezi sousedními atomy, což lze formálně (i když trochu nekonvenčně¹⁶) vzhledem ke konstrukci $\tilde{\psi}_n$ pro členy s coulombickým potenciálem definovat tak, že pro dané n je coulombická interakce ve vzdálenosti větší než $a_0 n^2 + \sqrt{2 \ln 2} \cdot n^{\frac{3}{2}} a_0$ považována za nulovou.

Konkrétně pro prvek M_{01} je:

$$\begin{aligned} M_{01} &= \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \left((\tilde{W}_n - W_n) - mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot \sum_{k=0, k \neq 1}^6 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_k|} \right) | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle = \\ &= (\tilde{W}_n - W_n) \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle + \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \left(-mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot \sum_{k=0, k \neq 1}^6 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_k|} \right) | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle = \\ &= (\tilde{W}_n - W_n) \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle - mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot \sum_{k=0, k \neq 1}^6 \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_k|} \right) | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle \quad (4.76) \end{aligned}$$

¹⁶postup může připomínat pseudopotenciály

Skalární součin $\langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\psi}_n^* \tilde{\psi}_n dV$, tzv. překryvový integrál, je obecně komplikované vypočítat, protože i když se jedná o funkce stejného průběhu, jsou vůči sobě navzájem prostorově posunuté. Protože jsou ale $\tilde{\psi}_n$ zkonstruovány jako po částech konstantní, a to buď nulové, nebo nenulové, je tento skalární součin roven objemu průniku oblastí s nenulovou hodnotou - nechť je označen S_{01} , obecně tedy S_{ji} . S přihlédnutím k úmluvě o dosahu coulombické interakce se podobně dá vypočítat i maticový element $\langle \tilde{\psi}_{i(n)} | \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_k|} \right) | \tilde{\psi}_{j(n)} \rangle \equiv I_{ikj}$ (tzv. coulombický integrál). Tedy

$$M_{01} = (\tilde{W}_n - W_n) S_{01} - mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot \sum_{k=0, k \neq 1}^6 I_{0k1}, \quad (4.77)$$

kde podle podmínky dosahu coulombické interakce je S_{01} nenulové a z maticových elementů I_{ikj} se ponechají jen ty, které odpovídají sousedním atomům – vyjde

$$M_{01} = (\tilde{W}_n - W_n) S_{01} - mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot (I_{001} + I_{011} + I_{061}). \quad (4.78)$$

V integrálech I_{0k1} se počítá objem překryvu tří prostorových útvarů, ale lze ukázat, že pro dva z nich k překryvu nedochází vůbec, lze tedy uzavřít

$$M_{01} = (\tilde{W}_n - W_n) S_{01} - mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} I_{001}. \quad (4.79)$$

Podobně lze vypočítat zbylých 48 prvků (respektive zbylých 20 nezávislých vzhledem k symetrii matice). Ukazuje se, že – kromě nulových – existují je tři formy opakujících se prvků, vedle M_{ij} ještě

$$M_{00} = (\tilde{W}_n - W_n) S_{00} - mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot 6I_{001} \quad (4.80)$$

a

$$M_{11} = (\tilde{W}_n - W_n) S_{11} - mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} \cdot 3I_{001}. \quad (4.81)$$

Protože se opakují stále stejné maticové elementy a protože z definice $S_{ii} = 1$, lze zavést (pro prvky nenulové v použitém přístupu) značení bez indexů jako $S \equiv S_{i,j \neq i}$ a I a dosadit ze libovolné povolené kombinace, tedy např. právě jako $S = S_{01}$ a $I = I_{001}$. Pokud by byl dosah coulombické interakce (nebo jiná zjednodušující podmínka) definován jinak, změnily by prvky nejen obecně svoji formu, ale zároveň by byly odlišné prvky M_{01} a M_{12} . Pro ještě úspornější značení nechť $w = w_n \equiv \tilde{W}_n - W_n$ a $Y \equiv -mc^2 \cdot \Lambda_C^2 \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} I$. Shrnutí:

$$A \equiv M_{00} = w + 6Y \quad (4.82a)$$

$$B \equiv M_{11} = w + 3Y \quad (4.82b)$$

$$C \equiv M_{01} = wS + Y \quad (4.82c)$$

V tomto úsporném zápisu je maticová rovnice soustavy tvaru

$$\begin{pmatrix} A & C & C & C & C & C & C \\ C & B & C & 0 & 0 & 0 & C \\ C & C & B & C & 0 & 0 & 0 \\ C & 0 & C & B & C & 0 & 0 \\ C & 0 & 0 & C & B & C & 0 \\ C & 0 & 0 & 0 & C & B & C \\ C & C & 0 & 0 & 0 & C & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \\ c_6 \end{pmatrix} = 0 \quad (4.83)$$

Sice velmi pracně, ale technicky bez potíží by šel nalézt determinant matice $M - \lambda I$ (I značí jednotkovou matici), což rovnici převede na polynomiální sedmého stupně v proměnné λ , kterou lze obecně v závislosti na parametrech A , B a C vyřešit jen při velké shodě náhod. Naštěstí symetrie úlohy umožňuje najít vlastní vektory jinak, a to dokonce bez výpočtu vlastních čísel. Stojí za povšimnutí, že matice obsahuje blok o velikost šest krát šest, který je po řádcích stejný až na posun prvků. Pokud se tento blok maticově vynásobí vektorem $(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6)^T = (1, 1, 1, 1, 1, 1)^T$, vyjde na každém řádku stejná rovnice $B + 2C = 0$. A pokud se vektor rozšíří o nultou pozici na $(c_0, 1, 1, 1, 1, 1, 1)^T$ a aplikuje na celou soustavu, soustava sedmi rovnic se zredukuje na dvě a vyjde

$$Ac_0 + 6C = 0 \quad (4.84a)$$

$$Cc_0 + B + 2C = 0, \quad (6x) \quad (4.84b)$$

odkud okamžitě plyne, že $c_0 = -\frac{6C}{A} = -\frac{B+2C}{C}$; pro určení energie je samotná hodnota c_0 ¹⁷ nepodstatná, důležitější je vztah mezi koeficienty A , B a C , který ze soustavy plyne:

$$-\frac{6C}{A} = -\frac{B+2C}{C} \Rightarrow 6C^2 = AB + 2AC \quad (4.85)$$

Dosazením za koeficienty podle definice vyplývá

$$6(wS + Y)^2 = (w + 6Y)(w + 3Y) + 2(w + 6Y)(wS + Y), \quad (4.86)$$

¹⁷která by navíc musela být zohledněna i o normalizační podmínku $\sum_{i=0}^6 |c_i|^2 = 1$

což vede na kvadratickou rovnici pro w :

$$(1 + 2S - 6S^2) w^2 + 11Yw + 24Y^2 = 0; \quad (4.87)$$

diskriminant rovnice je

$$D = 121Y^2 - 96(1 + 2S - 6S^2)Y^2 = (25 - 192S + 576S^2) Y^2 \quad (4.88)$$

a kořeny tedy

$$w = \frac{-11Y \pm \sqrt{25 - 192S + 576S^2} \cdot Y}{2(1 + 2S - 6S^2)} = \frac{-11 \pm \sqrt{25 - 192S + 576S^2}}{2(1 + 2S - 6S^2)} Y \quad (4.89)$$

Pro typické $S \ll 1$ lze výsledek odhadnout jako

$$\begin{aligned} w &= \frac{Y}{2} \cdot \left(-11 \pm 5 \cdot \sqrt{1 - \frac{192}{25}S + \frac{576}{25}S^2} \right) (1 + 2S - 6S^2)^{-1} \cong \\ &\cong \frac{Y}{2} \cdot \left(-11 \pm 5 \cdot \left(1 - \frac{96}{25}S + \frac{288}{25}S^2 \right) \right) (1 - 2S + 6S^2) \cong \\ &\cong \begin{cases} \left(-3 - \frac{18}{5}S \right) \cdot Y \\ \left(-8 + \frac{128}{5}S \right) \cdot Y. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.90)$$

Teď už je velmi snadné vyjádřit W_n ze substituce:

$$\begin{aligned} W_n &= \tilde{W}_n - w = \begin{cases} \tilde{W}_n - \left(-3 - \frac{18}{5} \cdot S \right) Y \\ \tilde{W}_n - \left(-8 - \frac{128}{5} \cdot S \right) Y \end{cases} = \\ &= \begin{cases} \tilde{W}_n + 3Y + \frac{18}{5}SY \\ \tilde{W}_n + 8Y + \frac{128}{5}SY \end{cases} \cong \begin{cases} \tilde{W}_n + 3Y \\ \tilde{W}_n + 8Y \end{cases} \end{aligned} \quad (4.91)$$

Výsledek je v obou případech menší než $\tilde{W}_n$, protože Y je záporné (a S malé), tedy se jedná o vazebný stav. Interpretace dvojího výsledku přijde záhy. Hodnota c_0 je pro určení energie irelevantní, ale budiž uvedeno, že je při zavedení $\chi \equiv \frac{A-B}{C}$ rovna $\chi - 1 \mp \sqrt{\chi^2 - 2\chi - 7}$ (bez uvážení normalizace).

Je vhodné ukázat ještě jeden případ, jednodušší – tak jako se zkusmo správně trefil vektor $\vec{c} = (c_0, 1, 1, 1, 1, 1)^T$, nabízí se zkusit také vektor $\vec{c} = (c_0, 1, -1, 1, -1, 1)^T$. Soustava rovnic se pak redukuje na

$$Ac_0 = 0 \quad (4.92a)$$

$$Cc_0 + B - 2C = 0 \quad (4.92b)$$

$$Cc_0 + 2C - B = 0, \quad (4.92c)$$

odkud snadno plyne $c_0 = 0$ a $B = 2C$. Návratem k substituci vychází

$$(w + 3Y) = 2(wS + Y) \Rightarrow w = \frac{Y}{2S - 1} = -\frac{Y}{1 - 2S} \cong -Y(1 + 2S) \quad (4.93)$$

odkud

$$= \tilde{W}_n - w = \tilde{W}_n - (-Y(1 + 2S)) = \tilde{W}_n + Y(1 + 2S) \cong \tilde{W}_n + Y \quad (4.94)$$

Porovnání těchto namátkou vybraných výsledků musí samozřejmě zohlednit, že $\tilde{W}_n$ i Y jsou záporné:

$$\tilde{W}_n + Y > \tilde{W}_n + 3Y > \tilde{W}_n + 8Y \quad (4.95)$$

Pokusit se najít všechny (lineárně nezávislé) vlastní vektory je možné podle symetrie systému. Blok matice šest krát diskutovaný už výše vlastně představuje vlivy okrajových atomů clusteru. Lze předpokládat, že žádný z nich není význačný, a tedy by se jejich působení měla vzájemně vyvažovat. Protože je symetrie šestičetná, nabízí se zkusit střídání koeficientů c_i po dvou, po třech a po šesti. Kombinace, které vyhovují, jsou:

$$c_1 = c_2 = c_3 = c_4 = c_5 = c_6 \quad (4.96a)$$

$$c_1 = c_2 = c_3, \quad c_4 = c_5 = c_6 \quad (+ \text{rotace}) \quad (4.96b)$$

$$c_1 = c_3 = c_5, \quad c_2 = c_4 = c_6 \quad (4.96c)$$

$$c_1 = c_2 = c_4, \quad c_3 = c_5 = c_6 \quad (+ \text{rotace}) \quad (4.96d)$$

$$c_1 = c_2 = c_5, \quad c_3 = c_4 = c_6 \quad (+ \text{rotace}) \quad (4.96e)$$

$$c_1 = c_2, \quad c_3 = c_4, \quad c_5 = c_6 \quad (+ \text{rotace}) \quad (4.96f)$$

$$c_1 = c_4, \quad c_2 = c_5, \quad c_3 = c_6 \quad (+ \text{rotace}) \quad (4.96g)$$

$$c_1 = c_3, \quad c_2 = c_4, \quad c_5 = c_6 \quad (+ \text{rotace}) \quad (4.96h)$$

$$c_1 = c_4, \quad c_2 = c_3, \quad c_5 = c_6 \quad (+ \text{rotace}) \quad (4.96i)$$

$$c_1 = c_4, \quad c_2 = c_6, \quad c_3 = c_5 \quad (+ \text{rotace}) \quad (4.96j)$$

Už podle intuice nepovedou k řešení možnosti (3.96d) a (3.96e), (3.96h), protože vlivy (váhy) jednotlivých atomů jsou velmi nerovnoměrné, což výpočet potvrzuje. Výpočtem jsou dále vyloučeny možnosti (3.96b), (3.96f) a (3.96j).

- Možnost (3.96a) doplněná o $c_0 \neq 0$ vede na už vypočítanou podmínku

$$W_n \cong \begin{cases} \tilde{W}_n + 3Y \\ \tilde{W}_n + 8Y \end{cases} ; \quad (4.97)$$

Protože existují dvě různá c_0 vyhovující této možnosti, existují také dva lineárně nezávislé dva vlastní vektory.

- Z možnosti (3.96c) vyplývá rovněž už vypočítané

$$W_n \cong \tilde{W}_n + Y; \quad (4.98)$$

vlastní vektor je pro tuto možnost jen jeden.

- Možnost (3.96g) vede na dva lineárně nezávislé vlastní vektory, ze kterých vyplývá podmínka $B = C^{18}$ – ta vede na energii

$$W_n = \tilde{W}_n + \frac{2}{1-S}Y \cong \tilde{W}_n + 2(1+S)Y \cong \tilde{W}_n + 2Y, \quad (4.99)$$

která je tedy dvojnásobná (dvakrát degenerovaná).

- Možnost (3.96i) vede rovněž na dvakrát degenerovanou energii

$$W_n = \tilde{W}_n + \frac{4}{1+S}Y \cong \tilde{W}_n + 4(1-S)Y \cong \tilde{W}_n + 4Y \quad (4.100)$$

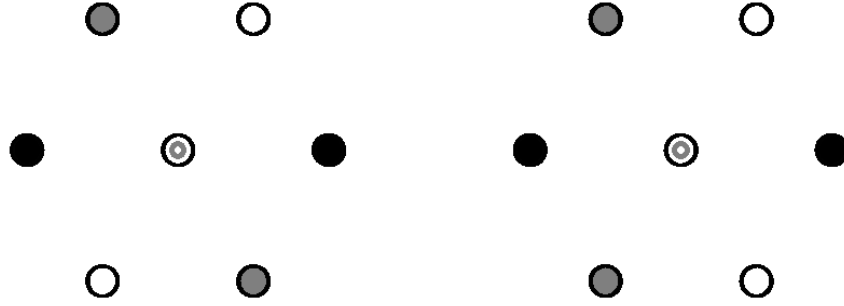
vyplývající z relace $B = -C$.

Dva vybrané případy ilustruje 4.4.

Protože úloha musí mít právě sedm lineárně nezávislých vektorů a k nim musí příslušet sedm vlastních čísel (některá mohou být pochopitelně stejná), lze vyslovit, že metoda LCAO pro cluster rydbergovské hmoty o velikosti $V = 1$ vede na uspořádané molekulární spektrum

$$\tilde{W}_n + Y > \tilde{W}_n + 2Y \text{ (2x)} > \tilde{W}_n + 3Y > \tilde{W}_n + 4Y \text{ (2x)} > \tilde{W}_n + 8Y; \quad (4.101)$$

¹⁸z obou stejná – jedná se o vektory příslušné vícenásobnému vlastnímu číslu matice M



Obr. 4.4: Symbolické znázornění hledání vlastních vektorů podle symetrie. V levé části je případ $c_1 = c_4$, $c_2 = c_5$, $c_3 = c_6$, tj. (7), který vlastním vektorem je, zatímco vpravo je $c_1 = c_4$, $c_2 = c_6$, $c_3 = c_5$, tj. (10), který naopak vlastním vektorem není.

pro připomenutí je uspořádání důsledkem toho, že je Y záporné¹⁹. Na těchto hladinách se s přihlédnutím k degeneracím rozmístí sedm elektronů systému, a to se zohledněním jednak Pauliho vylučovacího principu a jednak s uvažováním, že se pro daný (a všem společný) atomární stav n uvažuje jen jeden kolektivní molekulární stav, a to ten o nejnížší možné energii²⁰. Shrnutí vlastních vektorů matice soustavy a jim odpovídajících relací mezi maticovými elementy a energií:

$$\begin{array}{l|l|l}
 \begin{array}{l}
 (0, -1, +1, 0, -1, +1, 0)^T \\
 (0, -1, 0, +1, -1, 0, +1)^T \\
 (0, -1, -1, 0, +1, +1, 0)^T \\
 (0, +1, 0, -1, -1, 0, +1)^T \\
 (0, +1, 0, -1, -1, 0, +1)^T \\
 (c_0, +1, +1, +1, +1, +1, +1)^T \\
 (c_0, +1, +1, +1, +1, +1, +1)^T
 \end{array} &
 \begin{array}{l}
 B = C \\
 B = C \\
 B = -C \\
 B = -C \\
 B = 2C \\
 6C^2 - 2AC - AB = 0 \\
 6C^2 - 2AC - AB = 0
 \end{array} &
 \begin{array}{l}
 \tilde{W}_n + \frac{2}{1-S}Y \cong \tilde{W}_n + 2Y \\
 \tilde{W}_n + \frac{2}{1-S}Y \cong \tilde{W}_n + 2Y \\
 \tilde{W}_n + \frac{4}{1-S}Y \cong \tilde{W}_n + 4Y \\
 \tilde{W}_n + \frac{4}{1-S}Y \cong \tilde{W}_n + 4Y \\
 \tilde{W}_n + \frac{1}{1-2S}Y \cong \tilde{W}_n + Y \\
 \tilde{W}_n + \frac{1}{1-2S}Y \cong \tilde{W}_n + 3Y \\
 \tilde{W}_n + \frac{1}{1-2S}Y \cong \tilde{W}_n + 8Y
 \end{array}
 \end{array}$$

Výsledná energie n -tého molekulového orbitalu podle LCAO metody tedy konečně je

$$\begin{aligned}
 W_n &= 2 \cdot (\tilde{W}_n + 8Y) + 4 \cdot (\tilde{W}_n + 4Y) + 1 \cdot (\tilde{W}_n + 3Y) = 7\tilde{W}_n + 35Y = \\
 &= 7\tilde{W}_n + 35Y = 7(\tilde{W}_n + 5Y). \quad (4.102)
 \end{aligned}$$

¹⁹ $\tilde{W}_n$ je záporné také, ale to se v uspořádání neprojeví

²⁰excitaci je uvažována jen společnou změnou n všech atomů

4.7 Geometrický odhad překryvových a coulombických integrálů pomocí $\tilde{\psi}_n$

Pro dokončení analýzy této kapitoly zbývá vypočítat maticové elementy $S (= S_{01})$ a $Y (= Y_{001})$ – druhý jmenovaný explicitně figuruje ve výrazu pro celkovou energii n -tého stavu clusteru a výpočet prvního poslouží k ověření, že jeho zanedbání vůči jedničce pro vysoká n bylo oprávněné.

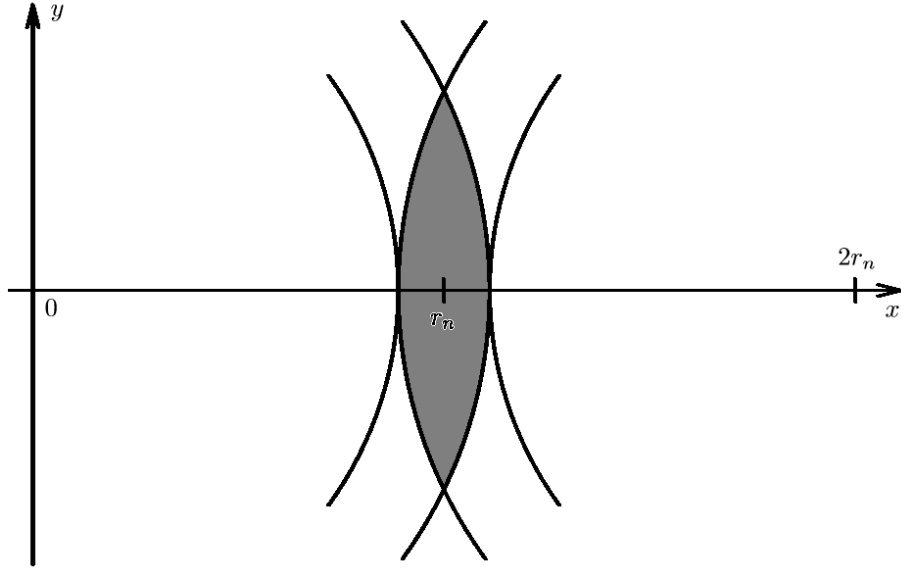
Vzhledem ke konstrukci $\tilde{\psi}_n$ bude tato úloha do značné míry úlohou geometrickou a pozornost bude věnována především stavům pro vysoká n , které jsou u rydbergovské hmoty ty podstatné a u nichž se očekává, že odchylky způsobené různými aproximacemi, které byly při odvozování učiněny, budou malé – integrály S i Y budou vyjádřeny v nejvyšší mocnině n . Nechť jsou tedy dány dva atomy s vlnovými funkcemi podle $\tilde{\psi}_n$ umístěné se svými (rovnoběžnými) ekvatoriálními rovinami v rovině x - y . Pokud by vzájemná vzdálenost jejich středů byla víc než $2\left(r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}\right)$, je zřejmé, že by průnik oblastí, kde jsou vlnové funkce obou atomů nenulové, byla prázdná množina, tedy i oba maticové elementy by byly nulové. Naopak pro vzdálenosti menší než $2\left(r_n - \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}\right)$ sice průnik existuje, ale už není souvislou množinou, navíc se pak polohy atomů vzdalují představě těsného uspořádání. Lze tedy očekávat, že vzájemná vzdálenost jader bude v tomto modelu někde v intervalu $\left(2r_n - \Delta_n^{(r)}, 2r_n + \Delta_n^{(r)}\right)$. V ideálním případě by se vyjádřily maticové elementy jako funkce této vzdálenosti a podle ní by se celková energie minimalizovala. Tento krok ale vzhledem k množství všech přiblížení, která už byla provedena (a která ještě přijdou), není příliš smysluplný a rovnou bude počítáno s pevně danou vzájemnou vzdáleností rovnou $2r_n$ jako Ansatzem²¹.

Nechť je zavedena pravotočivá kartézská soustava souřadnic tak, že v jádru jednoho z atomů je počátek souřadnic, osa x míří směrem k druhému jádru a osa z je kolmá na společnou ekvatoriální rovinu. Jádra atomů tedy mají souřadnice $(0, 0, 0)^T$ a $(2r_n, 0, 0)^T$.

Při vzájemné vzdálenosti $2r_n$ jsou průnikem oblastí podle (4.55) dva kulové vrchlíky bez horních a dolních částí (ve směru osy z) ořízlých podle hranice kuželové plochy, která je přirozeně dána omezením azimutálního úhlu na $\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}, \frac{\pi}{2} + \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}\right)$; řezy tímto útvarem jsou na Obr. 4.5 a Obr. 4.6. Výsledný útvar je složité pojmenovat a by bylo zbytečné vypočítávat jeho objem přesně; je zřejmé, že se skládá ze dvou identických polovin, symetrických vůči rovině $x = r_n$. Není složité si povšimnout, že každá z polovin je kvalitativně (co do tvaru) nezávislá na n a že s rostoucím n spočívá kvalitativní změna

²¹tato vzdálenost sice neodpovídá experimentálnímu $2.9r_n$, ale vejde se do intervalu teoreticky přípustných pro rydbergovskou hmotu a drží se rámce zde konstruovaného jednoduchého modelu

jejího tvaru v narovnávání konvexních částí po jeho obvodu. To umožňuje jejich objem poměrně hezky odhadnout pomocí útvarů s podstavou tvaru kruhové úseče – znázornění je na Obr. 4.7.



Obr. 4.5: Řez průnikem orbitalů $\tilde{\psi}_n$ dvou atomů rovinou $z = 0$. Jádra se nachází v bodech $(0,0)^T$ a $(2r_n,0)^T$. Oblast průniku je vybarvena šedou barvou a má podél osy x maximální šířku $\Delta_n^{(r)}$. V této rovině je oblast vymezena pouze povrchy koulí o poloměrech $r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}$ se středy v obou jádrech.

Rovnice kulových ploch ohraničujících vrchlíky jsou

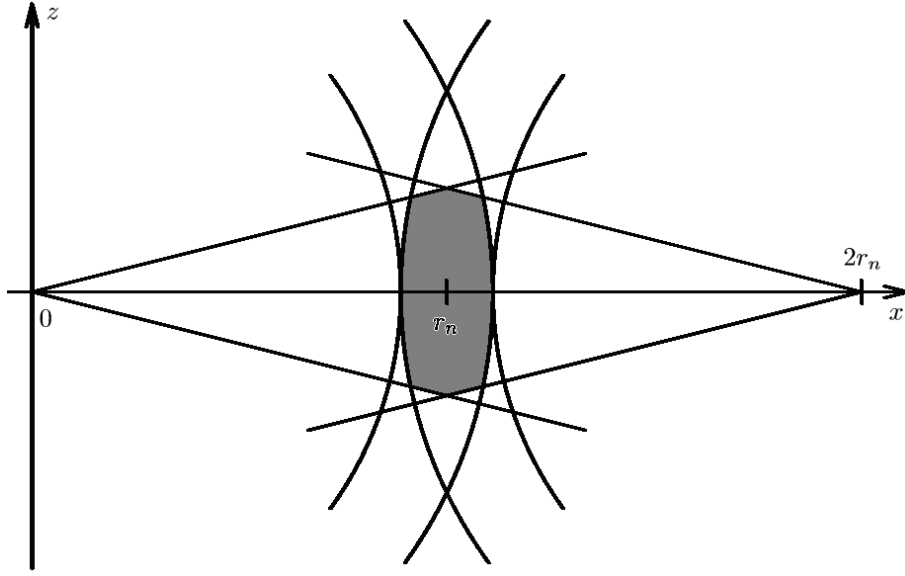
$$x^2 + y^2 + z^2 = \left(r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}\right)^2, \quad (4.103a)$$

$$(x - 2r_n)^2 + y^2 + z^2 = \left(r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}\right)^2 \quad (4.103b)$$

a zmíněné kuželové plochy jsou dány rovnicemi

$$z^2 = \left(\tan \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}\right)^2 (x^2 + y^2), \quad (4.104a)$$

$$z^2 = \left(\tan \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}\right)^2 ((x - 2r_n)^2 + y^2), \quad (4.104b)$$



Obr. 4.6: Řez průnikem orbitalů $\tilde{\psi}_n$ dvou atomů, tentokrát rovinou $y = 0$. Kromě povrchů koulí o poloměrech $r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}$ se středy v jádrech atomů $((0,0)^T$ a $(2r_n,0)^T$) je oblast vymezena také hranicí kuželové plochy (přímkami procházejícími jádry atomů). Oblast průniku je opět vybarvena šedě.

kde samozřejmě lze v souladu s (4.56) odhadnout $\tan \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \cong \sin \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \cong \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}$. Oba vrchlíky vytínají na rovině $x = r_n$ kružnici

$$y^2 + z^2 = \left(r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2} \right)^2 - r_n^2, \quad (4.105)$$

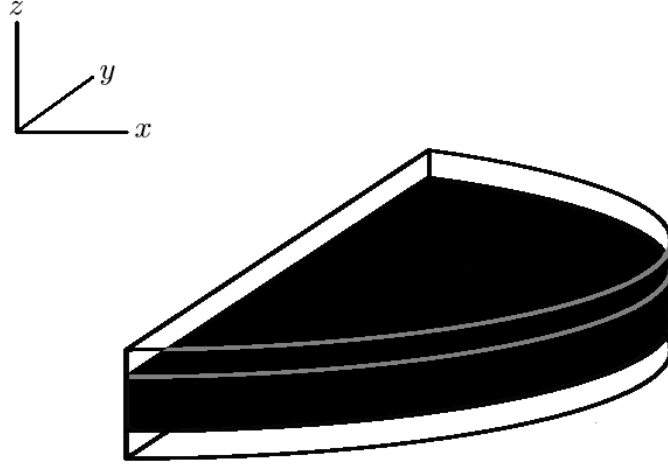
zatímco kuželové plochy hyperbolu

$$z^2 - \left(\frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \right)^2 y^2 = \left(\frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \right)^2 r_n^2; \quad (4.106)$$

z -ové souřadnice společných bodů kružnice (4.105) a hyperboly (4.106) jsou

$$z = \pm \left(\frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \right) \left(r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2} \right), \quad (4.107)$$

což jsou rohy velkého obdélníka z Obr. 4.7. Společné body ploch vrchlíků a kuželů v rovině $y = 0$ (čtyři z šesti vrcholů šedivé oblasti v Obr. 4.6) mají pak z -ové souřadnice



Obr. 4.7: Výpočet překryvového integrálu $S = \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle$, tj. objemu průniku oblasti, kde jsou vlnové funkce nenulové. Znázorněna je její polovina blíže jádru v bodě $(2r_n, 0, 0)^T$. Těleso je vyobrazeno pro vysoké n , u kterých jsou objemy konvexních částí po obvodu zanedbatelné a obrázek ani výpočet je nezahrnuje. Objem tělesa je odhadnut zespoda neprůhledným černým tělesem a shora celým velkým. Velký obdélník v levé části obrázku leží v rovině $x = 2r_n$; jeho vrcholy mají z -ové souřadnice přibližně $\pm \frac{\Delta_n^{(r)}}{2} \left(1 + \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}\right)$, zatímco vrcholy černého obdélníku jsou na souřadnicích $z \cong \pm \frac{\Delta_n^{(r)}}{2} \left(1 - \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}\right)$ – tloušťka útvaru se tedy dá odhadnout jako $\Delta_n^{(r)}$. Podstavou tělesa není půlkruh, ale kruhová úseč – jedná se o stejnou kruhovou úseč jako polovina šedé oblasti na Obr. 4.5, výška úseče je tedy $\frac{\Delta_n^{(r)}}{2}$ a poloměr kružnice, z níž výseč vzniká, je samozřejmě $r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}$.

$$z = \pm \left(\frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \right) \left(r_n - \frac{\Delta_n^{(r)}}{2} \right), \quad (4.108)$$

a ty jsou pak vrcholy černého obdélníka v Obr. 4.7. Pokud se všechny rozměry budou aproximovat podle členu s nejvyšší mocninou n , lze šířku útvaru z Obr. 4.7 odhadnout jednoduše jako

$$H = 2 \left(\frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \right) r_n = \Delta_n^{(\theta)} r_n. \quad (4.109)$$

Plocha výšky h kruhové úseče kruhu o poloměru r je dána jako

$$\begin{aligned}
\sigma &= r^2 \arccos\left(\frac{r-h}{r}\right) - (r-h)\sqrt{2hr-h^2} = \\
&= r^2 \left(\arccos\left(1 - \frac{h}{r}\right) - \left(1 - \frac{h}{r}\right) \sqrt{2\frac{h}{r} - \left(\frac{h}{r}\right)^2} \right) \equiv r^2 f\left(\frac{h}{r}\right); \quad (4.110)
\end{aligned}$$

pro kruhovou úseč z Obr. 4.7, tedy podstavu útvaru, je $\frac{h}{r} = \frac{\Delta_n^{(r)}}{2r_n} \cong \sqrt{\frac{2\ln 2}{n}}$, což je malá veličina pro vysoká n . Pro malé $\frac{h}{r}$ lze funkce $f\left(\frac{h}{r}\right)$ z (4.110) odhadnout pomocí Puiseuxovy řady jako $f\left(\frac{h}{r}\right) \cong \frac{4}{3}\sqrt{2}\left(\frac{h}{r}\right)^{\frac{3}{2}}$ a plocha úseče pak bude

$$\sigma \cong r^2 \frac{4}{3}\sqrt{2}\left(\frac{h}{r}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{4}{3}\sqrt{2} \cdot h^{\frac{3}{2}} r^{\frac{1}{2}}, \quad (4.111)$$

tedy konkrétně s $h = \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}$ a $r = r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}$

$$\sigma \cong \frac{4}{3}\sqrt{2} \cdot \left(\frac{\Delta_n^{(r)}}{2}\right)^{\frac{3}{2}} \left(r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \cong \frac{2}{3} \cdot \left(\Delta_n^{(r)}\right)^{\frac{3}{2}} (r_n)^{\frac{1}{2}} \quad (4.112)$$

a objem celé poloviny konečně

$$\begin{aligned}
V_{\frac{1}{2}} = \sigma H &= \frac{4}{3}\sqrt{2} \cdot \left(\frac{\Delta_n^{(r)}}{2}\right)^{\frac{3}{2}} (r_n)^{\frac{1}{2}} \Delta_n^{(\theta)} r_n = \\
&= \frac{2}{3} \cdot \left(\Delta_n^{(r)} r_n\right)^{\frac{3}{2}} \Delta_n^{(\theta)}, \quad (4.113)
\end{aligned}$$

tedy objem celého tělesa

$$\begin{aligned}
V = 2V_{\frac{1}{2}} &= \frac{4}{3} \cdot \left(\Delta_n^{(r)} r_n\right)^{\frac{3}{2}} \Delta_n^{(\theta)} = \\
&= \frac{4}{3} \left(2\sqrt{2\ln 2} a_0 n^{\frac{3}{2}} a_0 n^2\right)^{\frac{3}{2}} \cdot 2\sqrt{\frac{2\ln 2}{n}} = \\
&= \frac{16\sqrt{2}}{3} \cdot (2\ln 2)^{\frac{5}{4}} \cdot a_0^3 \cdot n^{\frac{19}{4}}. \quad (4.114)
\end{aligned}$$

Překryvový maticový element S je pak roven tomuto objemu násobenému kvadrátem normalizační konstanty podle (4.57). Tedy:

$$\begin{aligned} S = |C|^2 V &\cong \frac{\frac{4}{3} \Delta_n^{(\theta)} (r_n)^{\frac{3}{2}} \left(\Delta_n^{(r)} \right)^{\frac{3}{2}}}{2\pi r_n^2 \Delta_n^{(r)} \Delta_n^{(\theta)}} = \frac{2}{3\pi} \cdot \sqrt{\frac{\Delta_n^{(r)}}{r_n}} = \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{3\pi} \cdot (2 \ln 2)^{\frac{1}{4}} \cdot n^{-\frac{1}{4}} \end{aligned} \quad (4.115)$$

Integrál tedy s kvantovým číslem n klesá, což alespoň částečně ospravedlňuje jeho zanedbání vůči jedničce při výpočtu spektra clusteru (4.102).

Stejný objem jako (4.114) a zároveň stejnou šířku $H = \Delta_n^{(\theta)} r_n$ a délku $2h = \Delta_n^{(r)}$ má kvádr, jehož třetí strana má velikost

$$l = \frac{V}{H \cdot 2h} = \frac{4}{3} \cdot \left(\Delta_n^{(r)} r_n \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{4\sqrt{2}}{3} \cdot (2 \ln 2)^{\frac{1}{4}} \cdot a_0 \cdot n^{\frac{7}{4}}. \quad (4.116)$$

Tento kvádr, vycentrovaný vůči středu oblasti průniku orbitalů, je tedy (v pořadí os x , y a z) kartézský součin

$$\begin{aligned} M = \left\langle -\frac{\Delta_n^{(r)}}{2}, +\frac{\Delta_n^{(r)}}{2} \right\rangle \times \left\langle -\frac{2}{3} \left(\Delta_n^{(r)} r_n \right)^{\frac{1}{2}}, +\frac{2}{3} \left(\Delta_n^{(r)} r_n \right)^{\frac{1}{2}} \right\rangle \times \\ \times \left\langle -\frac{1}{2} r_n \Delta_n^{(\theta)}, +\frac{1}{2} r_n \Delta_n^{(\theta)} \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.117)$$

Kvádr představuje lineární přiblížení oblasti, přes kterou se má integrovat²². Podobně linearizovaný je i potenciál podle (4.64), lze tedy vzhledem k $H, h \ll r_n$ zapsat dokonce ještě výhodněji pro M psát

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} &= (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}} \cong \\ &\cong \left(\frac{1}{r} \right) \Big|_{\vec{r}=(r_n,0,0)}^T + \frac{\partial \left(\frac{1}{r} \right)}{\partial x} \Big|_{\vec{r}=(r_n,0,0)}^T (x - r_n) + \frac{\partial \left(\frac{1}{r} \right)}{\partial y} \Big|_{\vec{r}=(r_n,0,0)}^T y + \frac{\partial \left(\frac{1}{r} \right)}{\partial z} \Big|_{\vec{r}=(r_n,0,0)}^T z = \\ &= \left(\frac{1}{r} \right) \Big|_{\vec{r}=(r_n,0,0)}^T - \frac{x}{r^3} \Big|_{\vec{r}=(r_n,0,0)}^T (x - r_n) - \frac{y}{r^3} \Big|_{\vec{r}=(r_n,0,0)}^T y - \frac{z}{r^3} \Big|_{\vec{r}=(r_n,0,0)}^T z = \\ &= \frac{1}{r_n} - \frac{1}{r_n^2} (x - r_n) = \frac{2r_n - x}{r_n^2}, \end{aligned} \quad (4.118)$$

²²v původním útvaru má stejný objem a dva z rozměrů

Odhad coulombického integrálu podle členu s nejvyšší mocninou n tedy konečně je

$$\begin{aligned}
Y &= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot I_{001} = -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_0|} \right) | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle = \\
&= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \frac{1}{r} | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle \cong -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \frac{2r_n - x}{r_n^2} | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle = \\
&= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \frac{1}{r_n^2} \cdot \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | 2r_n - x | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle = \\
&= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \frac{1}{r_n^2} \cdot \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | 2r_n - x | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle = \\
&= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \frac{1}{r_n^2} \cdot |C|^2 \cdot \int_M (2r_n - x) dV = \\
&= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \frac{1}{r_n^2} \cdot |C|^2 \cdot \frac{4}{3} \left(\Delta_n^{(r)} r_n \right)^{\frac{1}{2}} r_n \Delta_n^{(\theta)} \int_{-\frac{\Delta_n^{(r)}}{2}}^{\frac{\Delta_n^{(r)}}{2}} (2r_n - x) dx = \\
&= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \frac{4}{3} |C|^2 \Delta_n^{(\theta)} \sqrt{\frac{\Delta_n^{(r)}}{r_n}} \int_{-\frac{\Delta_n^{(r)}}{2}}^{\frac{\Delta_n^{(r)}}{2}} (2r_n - x) dx = \\
&= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \frac{4}{3} |C|^2 \Delta_n^{(\theta)} \sqrt{\frac{\Delta_n^{(r)}}{r_n}} \left[-\frac{(2r_n - x)^2}{2} \right]_{-\frac{\Delta_n^{(r)}}{2}}^{\frac{\Delta_n^{(r)}}{2}} = \\
&= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \frac{8}{3} |C|^2 \Delta_n^{(\theta)} (r_n)^{\frac{1}{2}} \left(\Delta_n^{(r)} \right)^{\frac{3}{2}} = \\
&= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \frac{8}{3} \frac{\Delta_n^{(\theta)} (r_n)^{\frac{1}{2}} \left(\Delta_n^{(r)} \right)^{\frac{3}{2}}}{2\pi r_n^2 \Delta_n^{(r)} \Delta_n^{(\theta)}} = \\
&= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \frac{4}{3\pi} \cdot \sqrt{\frac{\Delta_n^{(r)}}{r_n^3}} = \\
&= -mc^2 \cdot \Lambda_C \cdot \alpha \cdot \frac{4\sqrt{2}}{3\pi} \cdot (2\ln 2)^{\frac{1}{4}} \cdot \frac{\alpha}{\Lambda_C} n^{-\frac{9}{4}} = \\
&= -mc^2 \cdot \alpha^2 \cdot \frac{4\sqrt{2}}{3\pi} \cdot (2\ln 2)^{\frac{1}{4}} \cdot n^{-\frac{9}{4}} = \\
&= -R_\infty \cdot \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \cdot (2\ln 2)^{\frac{1}{4}} \cdot n^{-\frac{9}{4}} \tag{4.119}
\end{aligned}$$

4.8 Spektrum energií clusteru

Konečně lze napsat hlavní výsledek této kapitoly

$$\begin{aligned} W_n &= 7\tilde{W}_n + 35Y = 7\left(\tilde{W}_n + 5Y\right) = -7R_\infty \left(\frac{1}{n^2} + \frac{40 \cdot \sqrt{2}}{3\pi} \cdot (2 \ln 2)^{\frac{1}{4}} \cdot \frac{1}{n^{\frac{9}{4}}} \right) = \\ &= -7R_\infty \cdot \frac{1}{n^2} \left(1 + \frac{40 \cdot \sqrt{2}}{3\pi} \cdot (2 \ln 2)^{\frac{1}{4}} \cdot \frac{1}{n^{\frac{1}{4}}} \right) = -7R_\infty \cdot \frac{1}{n^2} \left(1 + \frac{\kappa}{n^{\frac{1}{4}}} \right), \end{aligned} \quad (4.120)$$

kde bylo označeno $\kappa \equiv \frac{40 \cdot \sqrt{2}}{3\pi} \cdot (2 \ln 2)^{\frac{1}{4}} \cong 6.513$. Výsledkem je tedy součet energetických hladin sedmi atomů neinteragujících s ostatními plus záporná korekce z metody LCAO, v nejvyšším řádu úměrná $n^{-\frac{9}{4}}$. Pro $n \rightarrow +\infty$ jde výraz k ionizační hraně $W_n = 0$.

Velmi spekulativní, ale také velmi zajímavou, je interpretace rovinného clusteru rydbergovské nikoliv jako velké molekuly, ale jako velkého atomu – uspořádání uzlů, tedy jader, by se nezměnilo (jinak by mohl nastat rozpor s měřeními rotačních spekter), ale každý z elektronů by neobíhal kolem svého jádra, nýbrž všechny kolem společného středu clusteru. Jednalo by se tedy o atom, jehož kladný náboj není soustředěn v jednom malém jádru, ale v několika²³ rozmístěných s hexagonální symetrií v rovině.

Pokud by v tomto modelu bylo (například experimentálně změřené) spektrum podobné výsledku LCAO metody, tedy $W_n = -7R_\infty \cdot \frac{1}{n^2} \left(1 + \frac{\kappa}{n^\beta} \right)$, nabízela by se možnost použít místo metody LCAO metodu tzv. Quantum Defect Theory, tj. hledat výsledek (v prvním přiblížení) ve formě

$$W_n = -7R_\infty \cdot \frac{1}{(n + \delta_n)^2}. \quad (4.121)$$

V tom případě by vztah mezi κ , β a δ_n byl dán jako

$$\delta_n \cong -\frac{\kappa}{2} \cdot n^{+\frac{3}{4}}, \quad (4.122)$$

jak plyne z rozvoje.

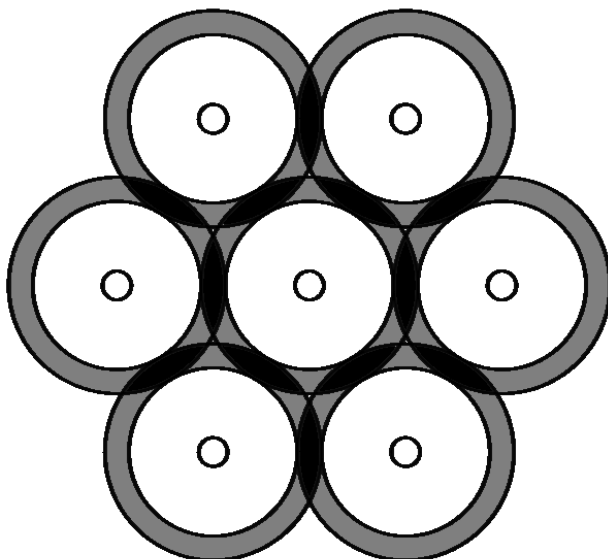
Tento přístup lze obhájit koincidencí mezi magickými čísly clusterů a protonovými čísly prvků, pro něž jsou dnes clustery rydbergovské hmoty (především) pozorovány – pro vodík, draslík a cesium: magická nebo polomagická čísla nejmenších clusterů, tedy 1, 19 a 55 jsou shodná s protonovými čísly vyjmenovaných prvků; navíc jsou alkalické, které mají jeden valenční elektron, pro který by mělo být stejně přirozené pohybovat se

²³počet rovná se některému z magických čísel

okolo jediného jádra a okolo clusteru jader jakožto myšleného jádra s určitým efektivním nábojem a dalšími korekcemi, jednou z nichž je právě δ_n .

Vysoce linearizovaný postup použitý pro výpočet coulombických a překryvových integrálů je hrubé přiblížení²⁴, přesto však ukazuje, že stav clusteru je pro vysoká n vázaný, tedy výhodnější než samostatná existence sedmi atomů. Naopak pro nízká n , kdy má nominálně dominovat S vůči jedničce, je korekce úměrná n^{-2} , tedy stejně jako původní vodíkové spektrum, a navíc kladná, což odpovídá odpuzování jader – to je ale v souladu se zjištěním z rešerše, že clusteru vznikají až od určitého kvantového stavu n počínaje. Jestli je v hrubém přiblížení tento kvalitativní závěr jen náhodný, se dá těžko soudit – více by prozradily přesnější podoby vlnových funkcí, přesnější výpočty integrálů vystupujících v LCAO, antisymetrizace celkové vlnové funkce atd. Je zajímavé, že pokud by se kvádrová oblast integrace Y nahradila například dvojicí jehlanů, vyšla by stejná mocninná závislost $n^{-\frac{9}{4}}$.

Obr. 4.8 znázorňuje v rovině clusteru výskyt elektronů v použitém modelu.



Obr. 4.8: Výskyt elektronů v rovině clusteru v použitém modelu. Šedivou barvou jsou orbitály atomů $\tilde{\psi}_n$, černou pak jejich průniky, tedy místa vzájemného ovlivňování, pro která byl odhadnut překryvový a coulombický integrál. Uspořádání elektronů se zjevně liší od grafénu, byť ten je také rovinný a má hexagonální symetrii.

²⁴ S bylo pro vysoká n zanedbáno vůči jedničce, přestože pro $n = 80$ je $S \cong 0.1$

Kapitola 5

Antivodík v experimentu AEGIS; trajektorie pohybu antivodíku v křížných polích

Tato kapitola se vrací k autorovu podílu na experimentu AEGIS v CERNu – podává stručný přehled o experimentu jako takovém a přibližuje výzkum, kterým autor k experimentu přispěl v bakalářském a magisterském studiu a hlavně v první polovině doktorátu; uváděná fakta se vztahují k době, kdy se autor problematikou zabýval, a vzhledem k případným úpravám v samotném experimentu nemusí být aktuální. V rámci této dizertace navazuje text kapitoly především na zjištění z kapitoly 2. Antivodíkem se rozumí vázaný stav jednoho pozitronu a jednoho antiprotonu. Protože formální přechod od atomu vodíku k antivodíku lze provést (například) pouhou změnou znamének kvantových čísel, tato kapitola mezi těmito částicemi striktně nerozlišuje. Křížnými poli se rozumí současný výskyt elektrického a magnetického pole libovolné vzájemné orientace. Uvažovány jsou především atomy antivodíku s vysokým kvantovým číslem n – tedy rydbergovské, v duchu celé této dizertace.

5.1 Experiment AEGIS a gravitační měření

Experiment AEGIS byl vybudován v CERNu u Ženevy na Antiprotonovém decelerátoru s úmyslem provést v úvodní fázi svého provozu historicky první přímé měření gravitačního zrychlení antihmoty¹ s přesností jednoho procenta. Měření se mělo uskutečnit na atomech antivodíku jakožto (anti)částicích, které jsou hmotné, elektricky neutrální a v prin-

¹přesněji: gravitačního zrychlení antihmoty v gravitačním/tíhovém poli Země

cipu stabilní, které lze relativně snadno připravit a se kterými lze manipulovat i při nízkých rychlostech².

Teoretické předpovědi takového měření nejsou jednoznačné – část odborné veřejnosti se přiklání k tvrzení, že trajektorie volného pádu bude stejná jako u běžné hmoty, jiní očekávají gravitační repulzi mezi hmotou a antihmotou³ nebo projev gravivektorových a graviskalárních interakcí⁴, které se mají u běžné hmoty vzájemně vyrušovat; rozhodnout musí experiment. Uvedená gravitační repulze nemusí být v rozporu s obecnou relativitou: V linearizované gravitaci, tedy pokud se metrický tenzor jen málo liší od plochého prostoročasu jako $g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} + h_{\mu\nu}$, a pro nízké rychlosti pohybu testovacích částic⁵ by se rovnice geodetiky pohybu testovací částice zjednodušila na

$$\frac{d^2 x^\rho}{d\tau^2} = - \sum_{\mu, \nu=0}^3 \Gamma^\rho_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx^\nu}{d\tau} \cong \frac{1}{2} \frac{\partial h_{00}}{\partial x_\rho} \left(\frac{dt}{d\tau} \right)^2, \quad (5.1)$$

kde h_{00} má původ ve zdroji gravitace a souvisí s klasickým gravitačním potenciálem přepočteným na jednotku hmotnosti testovací částice $\tilde{\phi}$ jako $h_{00} = -2\tilde{\phi}$. Aplikace CPT (nebo PT) inverze na rovnici (5.1), tedy ve smyslu možného mikroskopického výkladu antihmoty dá

$$\frac{d^2 x^\rho}{d\tau^2} \cong - \frac{1}{2} \frac{\partial h_{00}}{\partial x_\rho} \left(\frac{dt}{d\tau} \right)^2. \quad (5.2)$$

Pohyb antičástice v gravitačním poli stejného zdroje v tomto přístupu tedy vede na opačné gravitační zrychlení, než s jakým se pohybuje částice z běžné hmoty⁶. Podrobnější odvození lze nalézt v [1]; výpočet vychází z rozboru např. v [26].

²to vše jsou podmínky pro uskutečnění měření; je vhodné zkraje připomenout, že elektrická neutralita neznamena netečnost k elektrickým nebo magnetickým polím, se kterými může částice interagovat prostřednictvím svých dipólů, jak bylo demonstrováno např. v kapitole 2

³v případě antivodíku v tíhovém poli Země tedy "pád vzhůru"

⁴majících původ v Kaluzově-Kleinově teorii sjednocení gravitace a elektromagnetismu – v tom případě se předpovídá, že by antihmota na Zemi sice padala dolů, ale s o něco větším zrychlením než pro běžnou hmotu

⁵což obojí by byl případ měření v experimentu AEGIS

⁶naopak prostá C-inverze, kterou by podle CPT-teorému měla být hmota a antihmota jednoznačně odlišena, ke změně rovnice geodetiky nevede

5.2 Elektrická a magnetická pole v experimentu AEGIS

Koncept samotného měření byl na počátku zamýšlen podle filozofie zachytit antiprotony z Antiprotonového decelerátoru, nechat je při nízké teplotě rekombinovat s pozitronii⁷ a čerstvě vzniklé rydbergovské antivodíky elektromagneticky urychlit do oblasti mimo dosah elektrických a magnetických polí, kde by dominantní silou na antivodíky působící byla síla gravitační, a v této oblasti zkoumat trajektorii (obecně) šikmého vrhu – schéma s popiskem je v Obr. 5.1. To vše přirozeně v oblasti vysokého vakua. Možnost urychlení antiatomů pomocí elektrického nebo magnetického pole je pro experiment klíčová – tak jako lze pomocí elektrických a magnetických polí manipulovat s nabitými částicemi, lze s jejich pomocí působit i na neutrální atomy, pokud mají např. permanentní dipólové momenty.

V případě nabitých částic je toto působení popsáno Lorentzovou silou

$$\vec{F} = q \left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right) \quad (5.3)$$

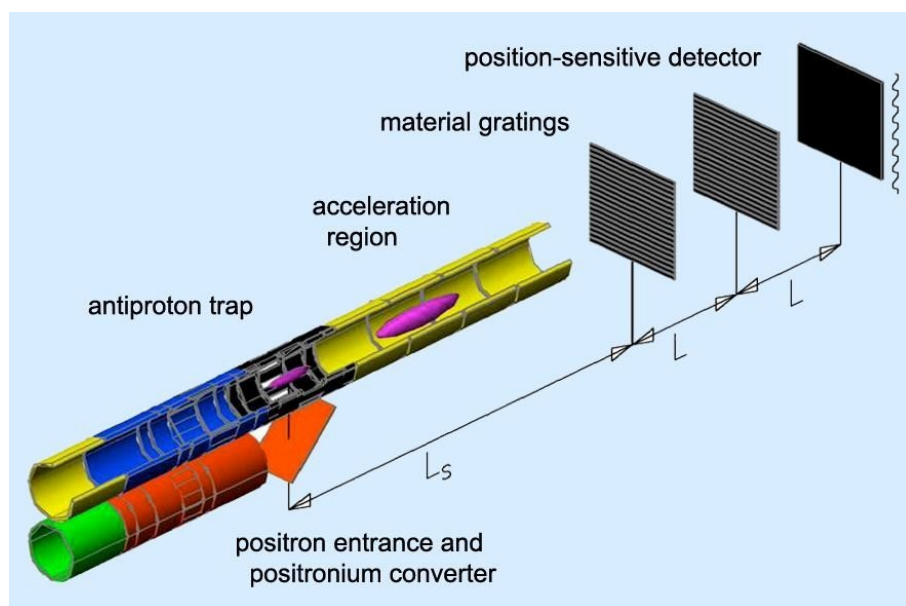
úměrnou náboji částice a vlastním hodnotám elektrické intenzity $\vec{E}$ a magnetické indukce $\vec{B}$ v daném místě. Pro dipólové částice je situace složitější; co se však standardně teoreticky předpokládá a co je experimentálně jasně prokázáno, je, že síla na atomy působící je úměrná prostorovým derivacím polí $\vec{E}$ a $\vec{B}$, neboli souhrnně jejich gradientům⁸.

Pro samotné vržení atomů antivodíku z oblasti jejich přípravy nábojovou výměnou do oblasti gravitačního měření se v experimentu zamýšlelo použít vhodně uspořádané elektrody, které by přivedením napětí na ně generovaly elektrostatické pole s gradientem právě ve směru zamýšleného vrhu. Nelze ovšem říct, že tyto elektrody urychlení vykonají samy, protože v oblasti, kde se nacházejí, je trvalo přítomno i silné magnetické pole kvůli manipulaci s antiprotony – vzájemné působení elektrických a magnetických polí na atom zároveň podle experimentu dokonce ani není lineární, což značně znesnadňuje vůbec návrh vhodných elektrod a rozbor výsledných sil⁹. Jisté (jak podle teorie, tak podle experimentu) je jen to, že pokud jsou v dané oblasti pole elektrické intenzity $\vec{E}$ a magnetické indukce $\vec{B}$ libovolně orientovaná, libovolně silná, ale homogenní (tedy bez gradientů), nebudou na těžiště atomu vodíku působit žádnou silou.

⁷tzv. reakce nábojové výměny, v AEGISu konkrétně: $p^- + Ps^* \rightarrow \bar{H}^* + e^-$, popř. se zdůrazněním okamžitých (rydbergovských) kvantových stavů reaktantů a produktů $p^- + Ps(n_{Ps}) \rightarrow \bar{H}(n_{\bar{H}}) + e^-$

⁸lapidárně řečeno, tak jako se od náboje přechází k dipólům jakožto dalšímu členu multipólového rozvoje, přechází se analogicky od nultých k prvním derivacím polí $\vec{E}$ a $\vec{B}$, na nichž bude záviset síla působící na atomy v těchto polích

⁹situaci by řešilo, kdyby samo magnetické pole urychlovalo antivodíky správným směrem (a elektrického pole by tedy nebylo vůbec třeba); autor tuto možnost také prověřoval



Obr. 5.1: Schéma nejdůležitějších součástí experimentu AEGIS. Oblast tvorby antivodíku je vyznačena černou barvou v levé polovině obrázku (společně s částí vyvedenou v modré barvě se pak zároveň jedná o antiprotonovou (Malmberg-Penningovu) past); antiprotony z Antiprotonového decelerátoru přichází do pasti, resp. oblasti tvorby antivodíku zleva, pozitronia potom zespodu od oranžového obdélníčku; malý fialový elipsoid v černé oblasti tvorby antivodíku zpodobňuje oblak právě vytvořených atomů antivodíku, větší v oblasti žluté pak tentýž oblak již uvedený do pohybu (starkovskými) urychlovacími elektrodami směrem doprava k oblasti gravitačního měření; obě polohy oblaků v obrázku přibližně inciduují i s umístěním urychlovacích elektrod zodpovědných za transfer antiatomů do oblasti gravitačního měření; celá levá polovina obrázku se nachází uvnitř silného magnetického pole nutného pro záchyt antiprotonů z Antiprotonového decelerátoru; naopak pravá polovina je vlivu tohoto magnetického a urychlovacího elektrického pole odstíněna – jedná se o oblast gravitačního měření; černý obdélník zcela vpravo představuje detektor vertikální souřadnice dopadajících atomů antivodíku; a konečně světlejší obdélníky mezi detektorem a levou polovinou obrázku jsou mřížky zodpovídající za generování interferenčního, resp. stínového obrazce na detektoru. Přibližně v místech styku levé a pravé poloviny obrázku mají elektrické i magnetické pole silné gradienty – vlevo jsou obě pole silná, vpravo zanedbatelná. Převzato z [27].

Význam hodný zvláštního – již výše použitého – označení mají v experimentu dvě oblasti:

- oblast tvorby antivodíku, kde se nejprve akumulují antiprotony, kde reakcí nábojové výměny antivodík vzniká a kde se nacházejí elektrody, jejichž sepnutím se čerstvě vyrobeným antiatomům má udělit příslušný impuls,
- a vzdálená oblast gravitačního měření, kam je účelem antivodíky přesunout, aby zde – odstíněny vlivu elektrických a magnetických polí v první oblasti – prodělaly samotný gravitační vrh.

Během svého života v těchto dvou oblastech a mezi nimi pocítí antiatomy hned dvakrát zásadní změnu v elektrických nebo magnetických polích – první při sepnutí elektrod a druhou kdesi mezi oběma oblastmi, kde se atom dostává z vlivu silných elektrických a magnetických polí do míst, kde jsou odstíněna, přes – přirozeně – velké gradienty zmíněných polí. První změna je čistě časová a je považována za dostatečně náhlou, aby se explicitní časové závislosti¹⁰ nevěnoval zřetel; druhá změna je ovšem zásadní, protože prostorovým gradientům polí je určitým způsobem úměrná síla, která na atomy působí a která tedy zásadním způsobem ovlivňuje jejich pohyb¹¹. Autorovi dizertace tehdy připadla úloha se touto problematikou zabývat – ideálně najít pohybovou rovnici atomů vodíku v elektrických a magnetických polích zároveň přítomných¹² a studovat podle ní trajektorie atomů v reáliích experimentu AEGIS.

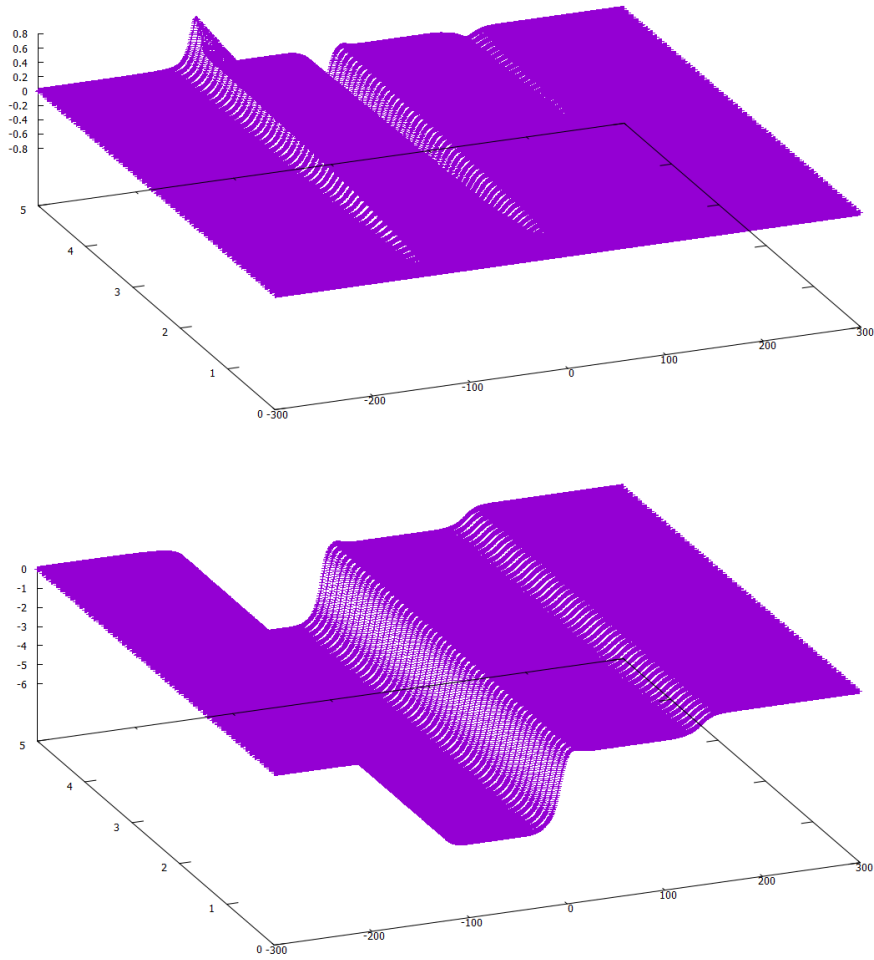
Magnetické pole má v experimentu AEGIS válcovou symetrii, je tedy plně popsáno dvěma složkami $B_r(r, z)$ a $B_z(r, z)$ ve dvou válcových souřadnicích r a z ; jedná se o stejnou symetrii, jako mají elektrická pole v (2.82). Podobná symetrie se předpokládá i pro elektrické pole urychlovacích elektrod a tato kapitola se jí drží¹³. Pohyb atomů v prostoru je omezen stěnami omezujícími oblast vysokého vakua – poloměr tohoto fyzického válce je přibližně 5 centimetrů. Tento válec má osu položenou horizontálně, tedy ve směru zamýšleného transferu antiatomů z oblasti přípravy do oblasti gravitačního měření, a je v Obr. 5.1 vykreslen po řadě ve žluté, modré, černé a znovu žluté barvě. Průběh magnetického pole, které je pevně dané a v rámci experimentu byla k dispozici jeho polní mapa, je v rozsahu $r \in (0, 5)$ [cm] a $z \in (-300, +300)$ [cm] na Obr. 5.2; $z = 0$ cm odpovídá oblasti tvorby antivodíku, v blízkosti $z = 300$ cm se pak nachází detektor.

¹⁰„náběhu“

¹¹přechod mezi oblastmi lze formálně chápat jako operaci transformace počátečních podmínek při vzniku antiatomů na počáteční podmínky vrhu v oblasti, kde se uvažuje jen síla gravitační

¹²tedy analogon již zmíněné Lorentzovy síly (5.3) platné pro nabitě částice

¹³všechna uvažovaná elektrická pole budou ve válcových souřadnicích popsána potenciálem $\Phi = \Phi(r, z)$



Obr. 5.2: Vykreslení polní mapy magnetického pole experimentu AEGIS podle interního dokumentu. Levo-pravý směr v rozsahu $(-300, +300)$ [cm] odpovídá válcové ose z , druhý rozměr základny je radiální válcová souřadnice $r \in (0, 5)$ cm a na svislé ose je magnetická indukce v teslách; horní polovina představuje $B_r(r, z)$, spodní pak $B_z(r, z)$.

5.3 Spektrum vodíku ve vnějších polích

Jeden z možných popisů atomu vodíku je hamiltoniánem

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{coul.}} + \hat{H}_{\text{fine}} + \hat{H}_{\text{elmg.}}, \quad (5.4)$$

kde po řadě coulombický hamiltonián $\hat{H}_{\text{coul.}}$, hamiltonián jemné struktury $\hat{H}_{\text{fine}}$ a hamil-

tonián interakce s vnějšími elektrickými a magnetickými poli $\hat{H}_{\text{elmg.}}$ jsou (v soustavě SI) po řadě dány jako

$$\hat{H}_{\text{coul.}} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}} = -m_e c^2 \left(\frac{1}{2}\Delta + \frac{\alpha\Lambda_C}{r} \right), \quad (5.5a)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{fine}} &= -\frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2} + \frac{e^2 \hbar^2}{4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} \hat{L} \cdot \hat{S} + \frac{e^2 \hbar^2}{8\epsilon_0 m_e^2 c^2} \delta(\vec{r}) = \\ &= m_e c^2 \left(-\frac{1}{8}\Lambda_C^4 \Delta^2 + \frac{\alpha\Lambda_C^3}{r^3} \hat{L} \cdot \hat{S} + \frac{\pi\alpha}{2}\Lambda_C^3 \delta(\vec{r}) \right), \end{aligned} \quad (5.5b)$$

$$\hat{H}_{\text{elmg.}} = \frac{e\hbar}{2m_e} B \left(\hat{L}_3 + 2\hat{S}_3 \right) + \frac{e^2 B^2}{8m_e} \hat{r}^2 \sin^2 \theta - eE (\hat{x} \sin \gamma + \hat{z} \cos \gamma). \quad (5.5c)$$

Hamiltonián $\hat{H}_{\text{coul.}}$ představuje neporušený popis atomu bez korekcí vyjádřených dalšími členy v (5.5)¹⁴; Schrödingerova rovnice $\hat{H}\psi_n = W_n\psi_n$ pro $\hat{H} = \hat{H}_{\text{coul.}}$ vede na spektrum energií vyjádřené Rydbergovou formulí

$$W_n = -\frac{R}{n^2} = -\frac{1}{2}m_e c^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2}, \quad (5.6)$$

kde α je konstanta jemné struktury, $m_e c^2$ je klidová energie elektronu, n hlavní kvantové číslo atomu vodíku a $R = \frac{e^2 m_e}{32\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2} = \frac{1}{2}m_e c^2 \alpha^2$ je Rydbergova konstanta vyčíslená ovšem pro hmotnost elektronu – korekce (5.6) na konečnou hmotnost jádra prostřednictvím redukované hmotnosti atomu μ je $W_n = -\frac{R}{n^2} \cdot \frac{\mu}{m_e}$.

Tzv. jemná struktura je zohledněna hamiltoniánem $\hat{H}_{\text{fine}}$; po řadě obsahuje první kinematickou relativistickou korekci, korekci na interakci mezi orbitálním a spinovým momentem hybnosti elektronu¹⁵ a korekci na fluktuace v elektronové orbitě (tzv. Darwinův člen). Celková oprava k energiím (5.6), pokud se $\hat{H}_{\text{fine}}$ uvažuje jako porucha k $\hat{H}_{\text{coul.}}$, je úměrná α^4 a v této práci se neuvažuje; $\hat{H}_{\text{fine}}$ je uváděn jen pro úplnost, aby bylo zřejmé, že obsahuje jiný člen závislý na $\hat{L}$ a $\hat{S}$ než $\hat{H}_{\text{elmg.}}$.

Konečně $\hat{H}_{\text{elmg.}}$ se také obvykle uvažuje jako porucha k $\hat{H}_{\text{coul.}}$; jeho formulace v jazyku $B = |\vec{B}|$ a $E = |\vec{E}|$ předpokládá takovou volbu soustavy souřadnic, že vektor magnetické indukce $\vec{B}$ je rovnoběžný s osou z a vektor elektrické intenzity $\vec{E}$ leží v rovině x - z ; γ je pak úhel sevřený vektory $\vec{B}$ a $\vec{E}$. Poslední člen v (5.5c) popisuje interakci atomu s elektrickým polem; první člen (tzv. paramagnetický) určuje vliv magnetického

¹⁴v (5.5a) ovšem může být bez přidávání dalších členů zahrnuta korekce na konečnou hmotnost jádra prostřednictvím redukované hmotnosti atomu

¹⁵samy operátory $\hat{L}$ a $\hat{S}$ jsou v tomto zápisu bezrozměrné

pole na atom vodíku; druhý člen (tzv. diamagnetický) je další způsob interakce vodíku s magnetickým polem, je však slabší než paramagnetický¹⁶ a v této práci se zanedbává. Při zanedbání diamagnetického členu je pak hamiltonián interakce vodíku s vnějšími elektrickými a magnetickými poli dán jako

$$\hat{H}_{\text{elmg.}} = \frac{e\hbar}{2m_e} B (\hat{L}_3 + 2\hat{S}_3) - eE (\hat{x} \sin \gamma + \hat{z} \cos \gamma) \quad (5.7)$$

a při neuvážení spinu elektronu (tzv. naivní hamiltonián) se ještě více zjednoduší na

$$\hat{H}_{\text{elmg.}} = \frac{e\hbar}{2m_e} B \hat{L}_3 - eE (\hat{x} \sin \gamma + \hat{z} \cos \gamma) \quad (5.8)$$

Aplikace poruchového počtu na atom vodíku s neporušeným hamiltoniánem $\hat{H}_{\text{coul.}}$ a poruchou $\hat{H}_{\text{elmg.}}$ při $\vec{E} = 0$, tedy přítomnosti jen magnetického pole, vede na (normální) Zeemanův jev – štěpení hladin (5.6) podle magnetického kvantového čísla $m \in \{-(n-1), \dots, n-1\}$ na $2n-1$ podhladin:

$$W_n = -\frac{R}{n^2} + \frac{e\hbar}{2m_e} Bm \quad (5.9)$$

Totéž pro $\vec{B} = 0$ (jen elektrické pole) dá Starkovo štěpení každé energetické hladiny (5.6) také na $2n-1$ podhladin, tentokrát ale podle tzv. parabolického kvantového čísla $p \in \{-(n-1), \dots, n-1\}$ [20]:

$$W_n = -\frac{R}{n^2} + \frac{3}{2} e a_0 n E p \quad (5.10)$$

Podobnost mezi (5.9) a (5.10) je víc než nápadná – korekční energie jsou přímo úměrné absolutní hodnotě vnějšího pole a kvantovému číslu probíhajícímu stejnou množinu. Nabízí se domněnka, že v křížných polích by rozštěpení mohlo být dáno jako superpozice (5.9) a (5.10), tedy

$$W_n = -\frac{R}{n^2} + \frac{e\hbar}{2m_e} Bm + \frac{3}{2} e a_0 n E p, \quad (5.11)$$

to je ale v rozporu s experimentem, podle kterého rozštěpené spektrum explicitně závisí na úhlu γ mezi vektory $\vec{E}$ a $\vec{B}$ ¹⁷. V kvantové mechanice se úloha nalezení porušeného spektra atomu vodíku v křížných polích zdá být analyticky neřešitelná. Tato potíž bezprostředně souvisí s tím, že elektrická a magnetická porucha v (5.5c) spolu explicitně nekomutují – přejde-li se z adaptované soustavy souřadnic v (5.5c) k obecné, přejde (5.5c) na

¹⁶kromě případu nulového obřítálního momentu elektronu

¹⁷o tom se lze přesvědčit i numerickým výpočtem [1]

$$\hat{H}_{\text{elmg.}} = \frac{e\hbar}{2m_e} \vec{B} \vec{L} - e\vec{E} \vec{R}. \quad (5.12)$$

Komutátor obou poruch v (5.12) je, jak bylo ukázáno v [1], dán jako

$$\left[\frac{e\hbar}{2m_e} \vec{B} \vec{L}, -e\vec{E} \vec{R} \right] = i\hbar \frac{e^2}{2m_e} (\vec{E} \times \vec{B}) \vec{R}, \quad (5.13)$$

tedy jen v případě, že je jedno z polí nulové, nebo pokud jsou obě pole rovnoběžná, platí odhad (5.11)¹⁸. Nesouměřitelnost obou poruch navíc také znamená, že kvantová čísla m a p jsou dobře definovaná jen pro přítomnost jednoho z polí – kvantové číslo m je dobře definované jen pro samotné magnetické pole; je-li elektrické pole nenulové (bez ohledu na to, je-li nenulové i magnetické pole), potom kvantové číslo m není dobře definované. Naopak pro kvantové číslo p – to se projevuje mimo jiné i tím, že pro nalezení Starkova spektra je potřeba přejít k vhodnější bázi než ψ_{nlm} .

Řešení překvapivě nabízí tzv. "stará kvantová teorie"¹⁹, tedy formalismus historicky používaný před formulací Schrödingerovy rovnice. Spektrum energií systému se v ní nejčastěji hledalo z tzv. periodických kvantovacích podmínek

$$\oint p_i dq_i = n_i h \quad (5.14)$$

pro kanonicky sdružené souřadnice q_i a hybnosti p_i ; integruje se pro jednu periodu pohybu systému při konstantní celkové energii. Jak je ukázáno v [19], podle (5.14) je přesně řešitelná úloha atomu vodíku s poruchou (5.12), a to pro nulové elektrické pole (výsledkem je Zeemanovo štěpení stejně jako (5.9)), pro nulové magnetické pole (vedoucí na Starkovo štěpení identické (5.10)), ale také úloha vodíku v křížných polích, tedy současné netriviální přítomnosti obou polí.

Protože je přístup díky (5.14) v podstatě nadstavbou klasické mechaniky, mají i výsledky klasickou interpretaci – u Zeemanova štěpení (Larmorovu) precesi vektoru (permanentního) magnetického dipólu $\vec{\mu}_m$ okolo směru $\vec{B}$, přičemž $\frac{e\hbar}{2m_e} m$ v (5.9) je průmět tohoto dipólu do směru $\vec{B}$ (tedy osy kužele opisovaného precesí). V případě elektrického pole je rovněž interpretována precese okolo směru $\vec{E}$, a sice (Laplace-)Runge-Lenzova vektoru $\vec{A}$. Konečně u atomu vodíku přítomného v křížných polích vede výpočet rovněž k precesi, konkrétně k dvojici nezávislých precesí dvou různých lineárních kombinací vektorů $\vec{\mu}_m$ a $\vec{A}$ kolem dvou lineárních kombinací směrů $\vec{E}$ a $\vec{B}$ – výsledek je:

¹⁸v [1] je uveden ještě jeden speciální případ, pro nějž se porušené spektrum podobné (5.11) dá dopředu uhodnout

¹⁹Old Quantum Theory

$$W_n = -\frac{R}{n^2} + \left| \frac{3}{2}a_0en\vec{E} + \frac{e\hbar}{2m_e}\vec{B} \right| n_A + \left| -\frac{3}{2}a_0en\vec{E} + \frac{e\hbar}{2m_e}\vec{B} \right| n_B \quad (5.15)$$

Že se jedná opravdu o dvojici precesí, je rozebráno v [1]. Nová kvantová čísla n_a a n_B nabývají hodnot z množiny $\{-\frac{n-1}{2}, \dots, +\frac{n-1}{2}\}$, tj. jdou po jedničce, v případě lichých n nabývají hodnot celých čísel a v případě suchých n potom polovičních zlomků. Degenerace n -té hladiny je pak n^2 , jak udává i moderní kvantová mechanika pro atom vodíku bez uvážení spinu. Jak z (5.15) plynou Starkův a Zeemanův jev je zřejmé; v obou případech je sice příslušné kvantové číslo dáno jako součet n_A a n_B , což ale neimplikuje, že by si rovná byla i čísla m a p , jak doloží rozbor (5.13). Explicitní závislost tohoto spektra na úhlu γ vyplne po rozepsání absolutních hodnot, jak lze nalézt v [1]; tamtéž autor navrhoval začlenění vlivu spinu elektronu prostým aditivním členem k (5.9), problematika ale ještě nebyla důkladněji prozkoumána – tato práce se drží bezspinového popisu. Autor vložil důvěru ve vztah (5.15) jako výchozí bod postulování dynamiky atomu v křížných polích.

5.4 Pohybová rovnice atomu vodíku v křížných polích

Dosud prezentovaný rozbor se týkal spektra atomu, tedy jeho vnitřního, časově neproměnného²⁰ uspořádání v jeho vlastní těžištové soustavě (standardně se dokonce jakékoliv vnější pole v objemu atomu předpokládá jako homogenní), což zdánlivě nijak nesouvisí s vnějšími silami, které na takový atom (resp. jeho těžiště) v elektrickém a magnetickém poli působí a které by měly být úměrný prostorovým derivacím těchto vnějších polí.

Dynamiku částice s permanentním dipólem ve vnějším poli, ať elektrickém nebo magnetickém, je běžně obsahem i úvodních kurzů elektromagnetismu. Protože je taková částice prostřednictvím svého dipólu v prostoru orientovaná, nejedná se přísně vzato o hmotný bod a má více než tři stupně volnosti. Magnetický dipól v magnetickém poli [28] se pohybuje podle silové a momentové rovnice

$$M\ddot{\vec{R}} = \vec{F} = (\vec{\mu}_m \cdot \vec{\nabla}) \vec{B}, \quad (5.16a)$$

$$\dot{\vec{L}} = \vec{M} = \vec{\mu}_m \times \vec{B}, \quad (5.16b)$$

kde $\vec{L}$ je moment hybnosti dipólové částice a M její hmotnost. Obě rovnice lze vysledovat například z rozboru sil působících na elementární proudovou smyčku jakožto model

²⁰pokud jsou neproměnná i vnější pole

částice s permanentním magnetickým dipólem. První rovnice sice popisuje vnější silový účinek pole na dipól ve smyslu translace, tedy podobně jako (5.3), ale nepodává o pohybu úplnou informaci, nýbrž tvoří s druhou z rovnic soustavu – první rovnice závisí na okamžité orientaci vektoru $\vec{\mu}_m$, kterou určuje druhá z rovnic; ta ale závisí na vektoru magnetické indukce v daném místě, který se při pohybu dipólu prostorem podle první rovnice může měnit²¹.

Soustavu (5.16) ovšem lze aplikací některých důvodných předpokladů. Prvním je předpoklad, že okamžitá precese daná rovnicí (5.16b) je v porovnání s pohybem dipólové částice prostorem natolik rychlá, že se při časovém vystředování účinky složek magnetického vektoru v rovině kolmé k ose precese efektivně vyruší a magnetický moment zůstane reprezentován jen svým průmětem $\vec{\mu}_{m(B)}$ ²² do směru $\vec{B}$. Druhým předpokladem je, že osa Larmorovy precese sleduje lokální směr magnetické indukce při pohybu částice prostorem okamžitě, tedy nevykazuje svého druhu setrvačnost v natáčení, dokmity a další jevy, které obecně vyloučit nelze. V [1] se jako podmínky splnění výše uvedených dvou předpokladů uvádí, aby pohyb dipólu prostorem byl nerelativistický a aby samo magnetické pole nebylo vysokofrekvenční. Jedná se o stejné úvahy jako v kapitole 2 při obhajobě zavedení potenciální energie (2.10) pro případ permanentního elektrického dipólu (pouze s podrobnější demonstrací na případě Larmorovy precese magnetického dipólu), kde byla aproximace nazvána kvazistatická, reps. adiabatická. Za těchto předpokladů je efektivně momentová rovnice vyloučena, částice má tři stupně volnosti a její dynamika je plně popsána silovou rovnicí

$$M\ddot{\vec{R}} = \vec{F} = -\vec{\nabla}W_p, \quad (5.17)$$

kde

$$W_p = \mu_{m(B)} \left| \vec{B}(\vec{R}) \right| = \mu_{m(B)} B(\vec{R}) \quad (5.18)$$

je efektivní potenciální energie částice v magnetickém poli, stejně jako je jí (2.10) pro elektrický dipól v poli elektrickém.

V klasické fyzice je úhel mezi vektory μ_m a $\vec{B}$ – a tedy i průmět $\mu_{m(B)}$ – při Larmorově precesi dán počátečními okolnostmi pohybu; v kvantové mechanice může nabývat jen diskretních hodnot – protože se úloha přeformulovala do řeči průmětu vektoru magnetického dipólu, není už složité identifikovat (5.18) se Zeemanovým štěpením (5.9). Potenciální energie (5.18) je tedy v případě magnetického pole pojítkem mezi mikrostruk-

²¹tím spíš se mění, pokud má magnetické pole v prostoru gradienty, které podle (5.16a) částici rozpo-

hybují

²²značení analogické vztahům (2.10) a (2.11) – a přidruženému textu – v kapitole 2

turou atomu a makroskopickými silovými účinky na něj jako celek pohybující se v prostoru. Stejně tomu bylo u elektrického dipólu v elektrickém poli (probráno v kapitole 2 této práce) a ke stejnému závěru vedla i analýza situace atomu v křížných polích v [1].

Lze shrnout, že úvaha postulování dynamiky vodíku nebo antivodíku spočívá v nalezení vztahu mezi permanentními dipóly atomu a jeho projekcemi, energií elektronu atomu porušeného vnějšími poli (tedy rozštěpeným spektrem atomu), potenciální energií celého atomu v těchto polích (vyjádřenou v projekcích dipólů) a silovými účinky těchto polí na atom jako celek²³. V rozboru je implicitně obhájen i zdánlivý paradox, že pro určení spektra atomu stačí brát vnější pole v místě atomu lokálně homogenní, zatímco síla, která na atom působí, explicitně závisí na prvních derivacích těchto polí. Vztah pro potenciální energii (5.15) byl převzat z [19] na základě identifikace průmětů dipólů v něm. Pohybová rovnice atomu antivodíku jako bodové částice v křížných polích je konečně dána jako²⁴

$$M\ddot{\vec{R}} = -\vec{\nabla} \left(-\frac{R}{n^2} + \left| \frac{3}{2}a_0en\vec{E}(\vec{R}) + \frac{e\hbar}{2m_e}\vec{B}(\vec{R}) \right| n_A + \left| -\frac{3}{2}a_0en\vec{E}(\vec{R}) + \frac{e\hbar}{2m_e}\vec{B}(\vec{R}) \right| n_B \right) \quad (5.19)$$

Matematicky jde o obyčejnou vektorovou autonomní diferenciální rovnici druhého řádu. Kromě [1] je zavedení této dynamiky shrnuto i v [18].

5.5 Rozměrový rámec experimentu

- V této sekci budou zmíněna vybrané uvažované parametry experimentu vycházející z [27] a [1].
- Magnetické pole experimentu AEGIS, vykreslené podle polní mapy na Obr. 5.2, má maximální indukci 3 T.
- Elektrická pole pro urychlení atomů mají horní limit intenzity 100 kV/m. Při těchto vnějších podmínkách jsou pro sousední kvantová čísla atomu vodíku n vyloučena křížení rozštěpených hladin.
- Excitace nebo ionizace atomů polem se zcela zanedbávají pro $n \leq 25$.

²³za předpokladu důvodné eliminace jinak nutné momentové rovnice

²⁴po výkladové stránce má ponechání i vynechání členu $-\frac{R}{n^2}$, který se derivací samozřejmě vynuluje, svoje výhody i nevýhody; je vhodné upozornit, že R je stále Rydbergova konstanta, nikoliv absolutní hodnota $\vec{R}$

- Kvantová čísla n připravovaného antiodíku budou odvislá od kvantových stavů pozitronií, ze kterých se připravují. Platí, že čím vyšší je stav pozitronií, tím vyšší bude nejen střed rozdělení stavů antiodíku, ale i jeho šíře. Vyšší kvantový stav – zhruba řečeno – prodlužuje dobu života daného stavu, zvyšuje účinný průřez reakce nábojové výměny a znamená i potenciálně²⁵ větší citlivost na vnější pole. Původně se jako ideální kvantový stav počítalo s $n = 35$, později se začaly brát v úvahu i stavy nižší (stále ale rydbergovské).
- Teplota v oblasti přípravě antiodíku by měla být držena na 0,1 K.
- Přivedení napětí na urychlovací elektrody v řádu nanosekund zaručuje poměrně přesné určení celkové doby letu²⁶ antiatomů k detektoru. Celý pohyb se skládá z přechodu atomu gradienty po obecně komplikované trajektorii a až potom gravitačního vrhu – počáteční podmínky druhého jmenovaného nejsou přímo měřitelné, ale je nutné je extrahovat z celkové doby letu, předpokládaného rozdělení kvantových stavů antiodíku, detailní znalosti použitých polí a pohybových zákonů antiatomů v nich²⁷.
- Rychlosti antiodíku po urychlení by se ideálně měly vejít mezi 100 a 1000 m/s.
- Kinematika přípravy antiodíku (tedy přenos hybnosti z antiprotonů na antiodíky) a jeho případné deexcitace byla řešena v [1], v této práci k nim není přikládán význam²⁸.

5.6 Autorův přínos k experimentu v době doktorátu

Autor dizertace se aplikací pohybové rovnice podle (5.19), kterou sestavil v rámci své diplomové práce, zabýval v první polovině doktorátu. Detailní pochopení procesů urychlení antiatomů v křížných polích²⁹ a přechod silných gradientů může mít pro samotný experiment zásadní význam. Autor svoje úsilí koncentroval převážně do následujících oblastí:

²⁵podle ostatních kvantových čísel, jejichž množina je ale od n odvislá

²⁶time-of-flight

²⁷autor postuluje (5.19)

²⁸změna rychlosti atomu antiodíku od zpětného rázu při vyzáření deexcitačního fotonu je sice sama o sobě zanedbatelná, při důsledné práci s deexcitacemi je ale potřeba vzít v potaz, že dojde ke změnám kvantových čísel a tím skokově i síly, která na atom působí

²⁹kdy nominálně jen jedno z polí je urychlovací, ale jejich současné působení na atom není lineární

- nalezení libovolného netriviálního pole (nebo polí), v nichž by se pro úlohu pohybu atomu podle (5.19) dalo najít přesné řešení (jako testovací řešení správnosti numerických algoritmů)
- sestavení simulačního programu pro numerické řešení pohybu antivodíku v reálných experimentu AEGIS
- nalezení přesného řešení Poissonovy rovnice pro elektrostatické pole, které by mělo válcovou symetrii a prostorové gradienty (také) ve směru osy této symetrie – pro studium urychlovacích schopností izolovaného elektrického pole vzhledem k atomům
- prověření možnosti, jestli samo magnetické pole nemá pro některé kvantové stavy antivodíku urychlovací schopnost (a tedy elektrické pole by nebylo vůbec potřeba)
- volba vhodného testovacího elektrického pole s urychlovací schopností z třetího bodu výčtu, porovnávání trajektorií antivodíku v tomto poli samotném, v samotném daném magnetickém poli experimentu AEGIS a v obou (křížných) polích zároveň a doložení, že obě pole zároveň umožní s antivodíkem manipulovat zamýšleným způsobem, na konstruktivním příkladu

První bod je náplní kapitoly 2 této dizertace, tedy keplerovský pohyb částic s permanentním elektrickým dipólem v prostoru mezi koaxiálními válcovými elektrodami. Pro atom vodíku samozřejmě stačí dosazovat průměty dipólu podle Starkova štěpení jako $\mu_{e(E)} = \frac{3}{2}a_0enp$. Ostatním bodům se budou věnovat následující sekce. Autorovy závěry přispěly k pochopení problematiky, byly prezentovány kolaboraci experimentu a zohledněny v kolektivních publikacích kolaborace, např. [29] nebo [30], kde je autor dizertace uveden jako spoluautor.

5.7 Simulační program a výsledky vybraných simulací

Autor vedl skupinu, která napsala program pro simulaci pohybu atomů antivodíku v experimentu AEGIS. Tento program je nástroj pro numerickou integraci rovnice (5.19) při zadaných $\vec{E}(\vec{R})$ a $\vec{B}(\vec{R})$, konkrétně metodou Runge-Kutta. Protože se obě pole předpokládají s válcovou symetrií, zadávají se obě pole na dvourozměrné (r - z) mříži – tzv. polí mapě; v případě magnetického pole se tedy jedná o dvojici funkcí $B_r(r, z)$ a $B_z(r, z)$ ³⁰ vyčíslenou v konečném počtu diskretních uzlů; podobně pro pole elektrické.

³⁰vykreslenou pro případ magnetického pole experimentu AEGIS na obr. 5.2

Možný způsob, jak se pro obecný polohový vektor určí hodnoty polí z takové diskrétní mříže, je probrán v druhé části kapitoly 2 této dizertace – návod je aplikovatelný i na více-rozměrnou funkci více proměnných, což $\vec{E}(\vec{R})$ i $\vec{B}(\vec{R})$ obecně jsou, navíc zohledňuje i nutnost, aby interpolovaná³¹ funkce byla spojitá včetně prvních prostorových derivací³². Simulátor přerušil běh, pokud se částice dostane do míst, kde končí vakuová oblast³³. Autor odvodil, sestavil a otestoval dílčí procedury v jazyce PASCAL, jejich převod do jazyka C++ a zkompletování do formy přístupnější pro další uživatele bylo na ostatních členech skupiny; autor by obzvláště rád jmenoval studenta Rastislava Čermáka. Pohyb atomu v cylindrickém elektrickém poli (2.21c), přesně odvozený v kapitole 2, posloužil jako dobrý dílčí test správnosti průběhu a výsledku simulací; pro uzavřené trajektorie se výsledky simulací od přesných lišily zanedbatelně i po mnoha periodách oběhu. Práce na simulačním programu završila autorův podíl na experimentu AEGIS; program byl použit při psaní několika studentských prací [31, 32].

5.8 Elektrické pole s gradienty podél válcové symetrie

Autor řešil úlohu nalezení takového přesného řešení Poissonovy rovnice ve válcových souřadnicích³⁴

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = 0, \quad (5.20)$$

aby řešení vykazovalo prostorové derivace ve směru (válcové) osy z . Nejintuitivnějším by bylo takové, které by se místo přesně válcového tvaru volně rozevíralo do trychtýře – zajímavým se ukázal být potenciál poskládaný z partikulárních řešení (2.82) jako

$$\Phi(r, z) = \left(\frac{z - z_\infty}{z_{\text{id.}} - z_\infty} \right) \cdot \left(\frac{\ln \frac{r}{r_{\text{in}}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} (\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}) + \Phi_{\text{in}} \right); \quad (5.21)$$

druhá závorka je identická (2.21c) a první obsahuje dva volné parametry $z_{\text{id.}}$ a z_∞ s rozměrem délky.

Že se jedná o přesné řešení, má hned dvě výhody – jednak numerické řešení pohybu částic v tomto poli není v principu zatíženo přibližnou znalostí pole a jednak z přesného tvaru (5.21) lze snadno odvodit rovnice ekvipotenciál $\Phi(r, z) = \Phi_{\text{konst.}}$ jako $r = r(z; \Phi_{\text{konst.}})$:

³¹”vysplínovaná”

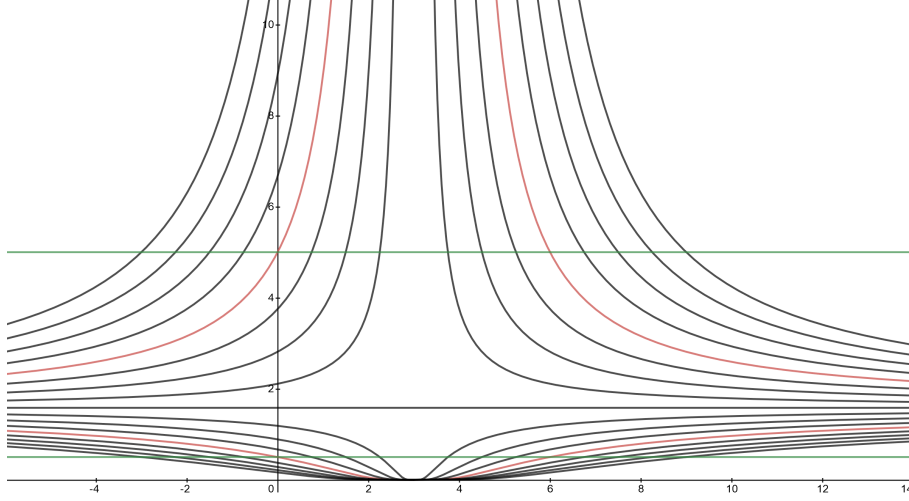
³²jinak hrozí, že řešení bude nefyzikální, jak se v kapitole 2 také diskutovalo

³³”náraz na stěnu”

³⁴tedy (2.15) pro případ $\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = 0$, ale obecně $\frac{\partial \Phi}{\partial z}$ nulové není, na rozdíl od (2.16)

$$r = r_{\text{in}} e^{\frac{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}}{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}} \cdot \left(\frac{z_{\text{id.}} - z_{\infty}}{z - z_{\infty}} \cdot \Phi_{\text{konst.}} - \Phi_{\text{in}} \right)} \quad (5.22)$$

Tyto křivky zároveň představují tvary elektrod³⁵, které by příslušné pole generovaly.



Obr. 5.3: Schématické zobrazení elektrického pole (5.21) pomocí ekvipotenciál (5.22) v rovině r - z . Vodorovná osa je osa z , svislou osou je pak radiální $r \geq 0$. Zeleně jsou pro srovnání vyznačeny dvě přesně válcové elektrody řešení (2.21c), červeně pak ty ekvipotenciály řešení (5.21), které mají parametry společné s (2.21c) – protínají se na $z = z_{\text{id.}}$, které je zde rovno 0. Pro vykreslení bylo (bez specifikace jednotek) voleno: $\Phi_{\text{out}} = 2$, $\Phi_{\text{in}} = -2$, $r_{\text{out}} = 5$, $r_{\text{in}} = 0,5$; pro poslední parametr je voleno $z_{\infty} = 3$. Řešení (5.21) má právě jednu (v obrázku rovněž zobrazenou) ekvipotenciálu přesně válcovou, konkrétně $\Phi = 0$, která nastává pro $r = r_{\text{in}} \left(\frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}} \right)^{\frac{\Phi_{\text{in}}}{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}}$, zde tedy $\frac{\sqrt{10}}{2}$.

Podle potenciálu (5.21) jsou složky elektrické intenzity určeny jako³⁶

$$E_z = -\frac{\partial \Phi}{\partial z} = -\frac{1}{z_{\text{id.}} - z_{\infty}} \cdot \left(\frac{\ln \frac{r}{r_{\text{in}}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} (\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}) + \Phi_{\text{in}} \right), \quad (5.23a)$$

$$E_r = -\frac{\partial \Phi}{\partial r} = -\frac{z - z_{\infty}}{z_{\text{id.}} - z_{\infty}} \cdot \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \cdot \frac{1}{r}, \quad (5.23b)$$

³⁵a jím příslušná napětí

³⁶je vhodné poznamenat, že v tomto testovacím poli z podstaty není možné zkoumat přechody atomů přes gradienty elektrického pole do oblasti, kde pole vymizí; přechodu přes tyto gradienty v případě magnetického pole se ale simulace v následující sekci důsledně věnují

a samozřejmě triviálně $E_\varphi = 0$. Absolutní hodnota je pak dána jako

$$\begin{aligned}
E &= \left| \vec{E} \right| = \sqrt{E_r^2 + E_z^2} = \\
&= \sqrt{\left(\frac{z - z_\infty}{z_{\text{id.}} - z_\infty} \cdot \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \cdot \frac{1}{r} \right)^2 + \left(\frac{1}{z_{\text{id.}} - z_\infty} \cdot \left(\frac{\ln \frac{r}{r_{\text{in}}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} (\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}) + \Phi_{\text{in}} \right) \right)^2} = \\
&= \pm \frac{1}{z_{\text{id.}} - z_\infty} \cdot \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \cdot \sqrt{\left(\frac{z - z_\infty}{r} \right)^2 + \left(\ln \frac{r}{r_{\text{in}}} + \frac{\Phi_{\text{in}}}{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}} \cdot \ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}} \right)^2}. \quad (5.24)
\end{aligned}$$

Po dosazení do (5.19), tedy dalším derivování a zkomplexnění výrazu, nevzbuzuje toto pole příslib nalezení nějakého přesného řešení. Nadějný by mohl být pohyb podél válcové ekvipotenciály popsané v Obr. 5.3 – pro ni (popř. v její těsné blízkosti) je totiž druhá závorka pod odmocninou nulová, a tedy

$$E = \pm \frac{z - z_\infty}{z_{\text{id.}} - z_\infty} \cdot \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \cdot \frac{1}{r}. \quad (5.25)$$

Pohybové rovnice pak tedy podle (5.19) jsou

$$M\ddot{r} = \pm \mu_{e(E)} \cdot \frac{z - z_\infty}{z_{\text{id.}} - z_\infty} \cdot \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \cdot \frac{1}{r^2}, \quad (5.26a)$$

$$M\ddot{z} = \mp \mu_{e(E)} \cdot \frac{1}{z_{\text{id.}} - z_\infty} \cdot \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \cdot \frac{1}{r}. \quad (5.26b)$$

Při označení $A \equiv \frac{\mu_{e(E)}}{M} \cdot \frac{1}{z_{\text{id.}} - z_\infty} \cdot \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}}$ a $\tilde{z} \equiv z - z_\infty$ přechází (5.26) na

$$\ddot{r} = \pm \frac{A\tilde{z}}{r^2}, \quad (5.27a)$$

$$\ddot{\tilde{z}} = \mp \frac{A}{r}. \quad (5.27b).$$

Porovnáním obou rovnic vyplývá $f(r) = \ddot{r}r = -\ddot{\tilde{z}}\tilde{z} = g(\tilde{z})$, takže obě strany bilance musí být rovny konstantě, a to už jednoduché diferenciální rovnice jsou. Žádné řešení soustavy se ale nedrží v blízkosti válcové ekvipotenciály na $r = r_{\text{in}} \left(\frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}} \right)^{\frac{\Phi_{\text{in}}}{\Phi_{\text{in}} - \Phi_{\text{out}}}}$, pro kterou bylo (5.24) zjednodušeno na (5.25), řešení tedy nelze považovat za platná. Analýza je ale užitečná v tom, že lze očekávat pohyb podobného typu jako $\ddot{r} = \frac{\text{konst.}}{r}$, což v rovině kolmé na osu z obecně vede na neuzavřené trajektorie, jak simulace v nezjednodušeném (5.24) také potvrzují.

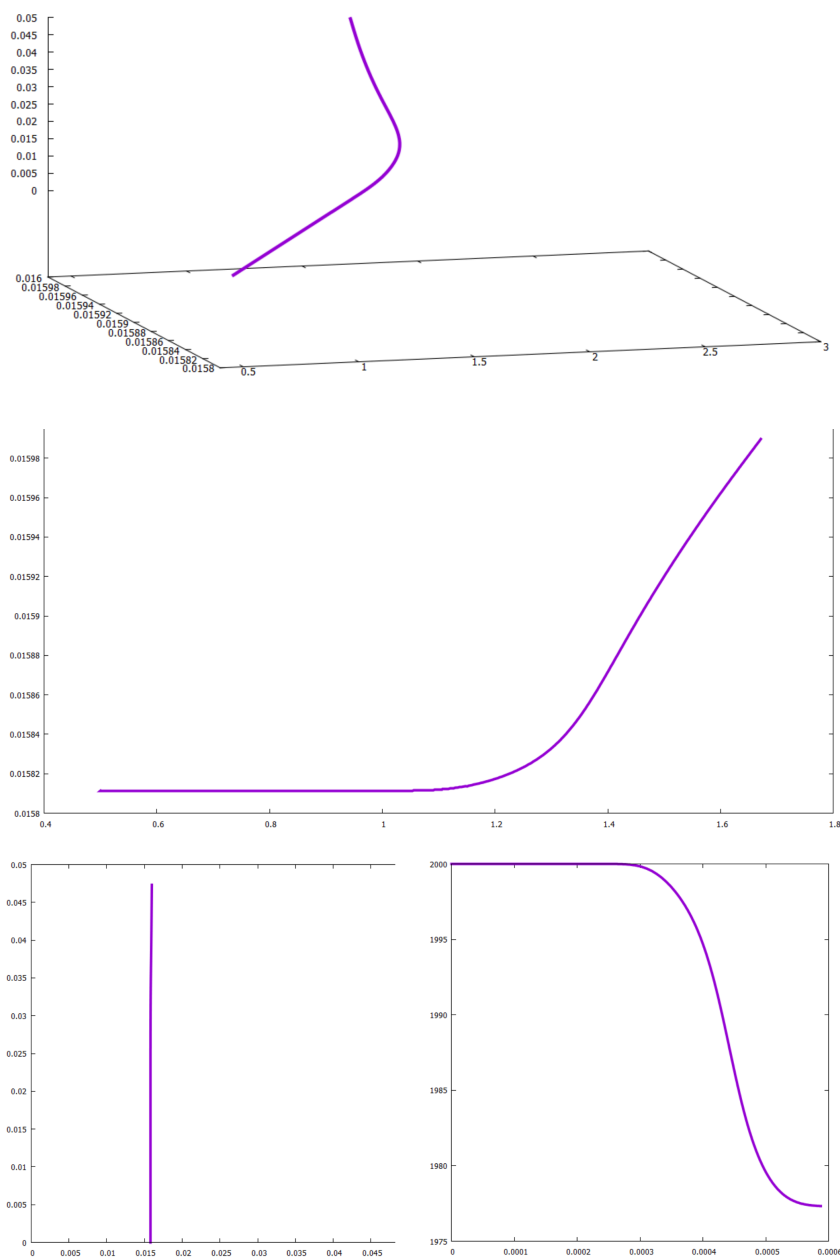
5.9 Výsledky simulací

V simulačním programu popsaném v sekci 5.7 byly zkoumány pohybové tendence atomů vodíku, resp. antivodíku. Jako pole, ve kterých se pohybovaly, byly voleny magnetické pole experimentu AEGIS, představené v Obr. 5.2, a elektrické pole podle (5.21) s následujícími parametry:

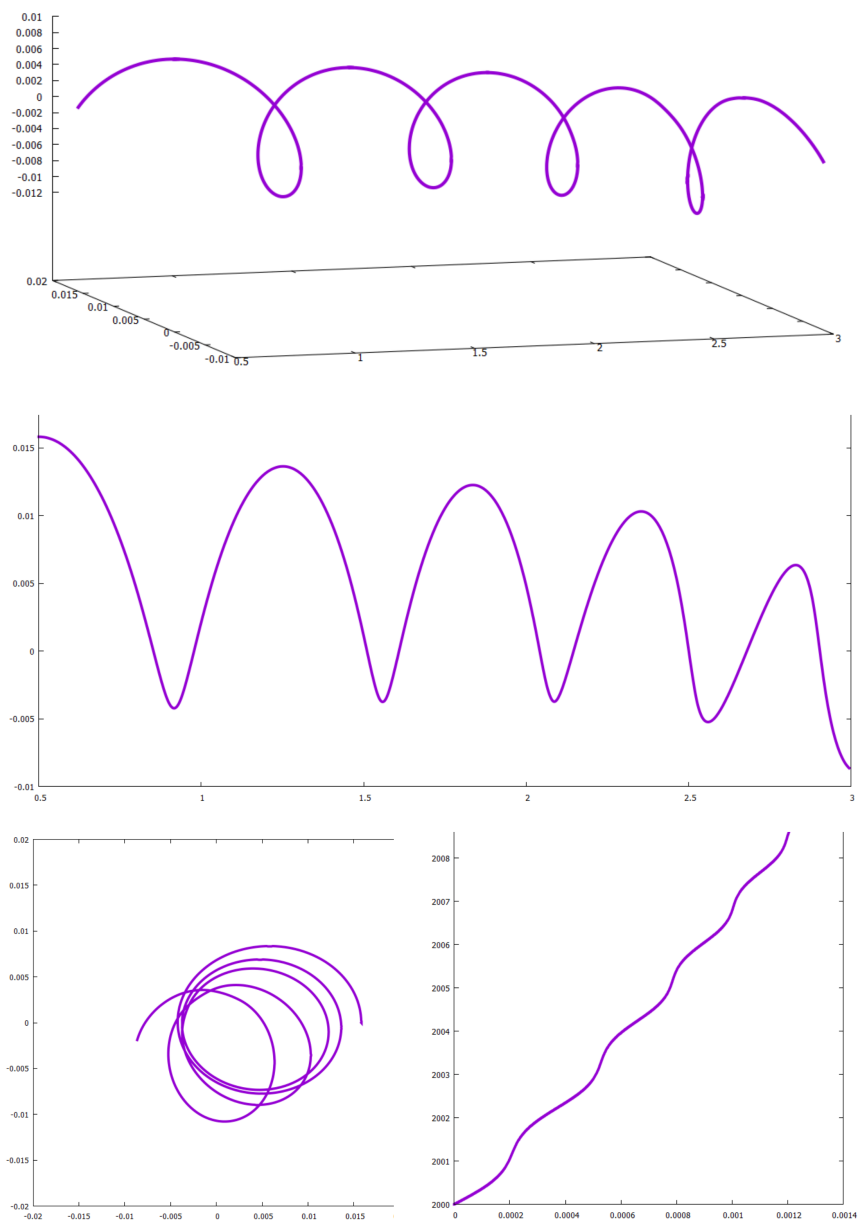
$$\Phi_{\text{out}} = +200 \text{ V}, \Phi_{\text{out}} = -200 \text{ V}, r_{\text{out}} = 0,05 \text{ m}, r_{\text{out}} = 0,005 \text{ m}, z_{\text{id.}} = 0, z_{\infty} = 4 \text{ m} \quad (5.28)$$

Pole s těmito parametry v rozhodné oblasti podle (5.21) vyhovuje limitu 100 kV/m a elektrody, které jej budí, se vejdou do vakuové oblasti popsané v sekci 5.2. Numerické simulace, a to ani ve velkém počtu nemohou podat vyčerpávající zprávu o možnostech pohybu částic v polích; autor hledal speciální druhy trajektorií. Účelem simulací prezentovaných v této dizertaci konkrétně bylo prokázat, že pole (5.21) urychluje atomy ve směru osy z a že v křížných polích je možný urychlený pohyb antivodíků ve smyslu potřeby experimentu AEGIS, uvedené dříve v této kapitole; a také prověřit možnost požadovaného urychlení antiatomů samotným polem magnetických. Příklady úspěšných simulací jsou shrnuty v obrázcích. V simulacích, kde bylo přítomno magnetické pole (ať už samo, nebo s elektrickým), byly uvažovány jen ty trajektorie částic, které alespoň jednou přejdou přes jeho velký prostorový gradient. Časový krok byl volen 10 ns.

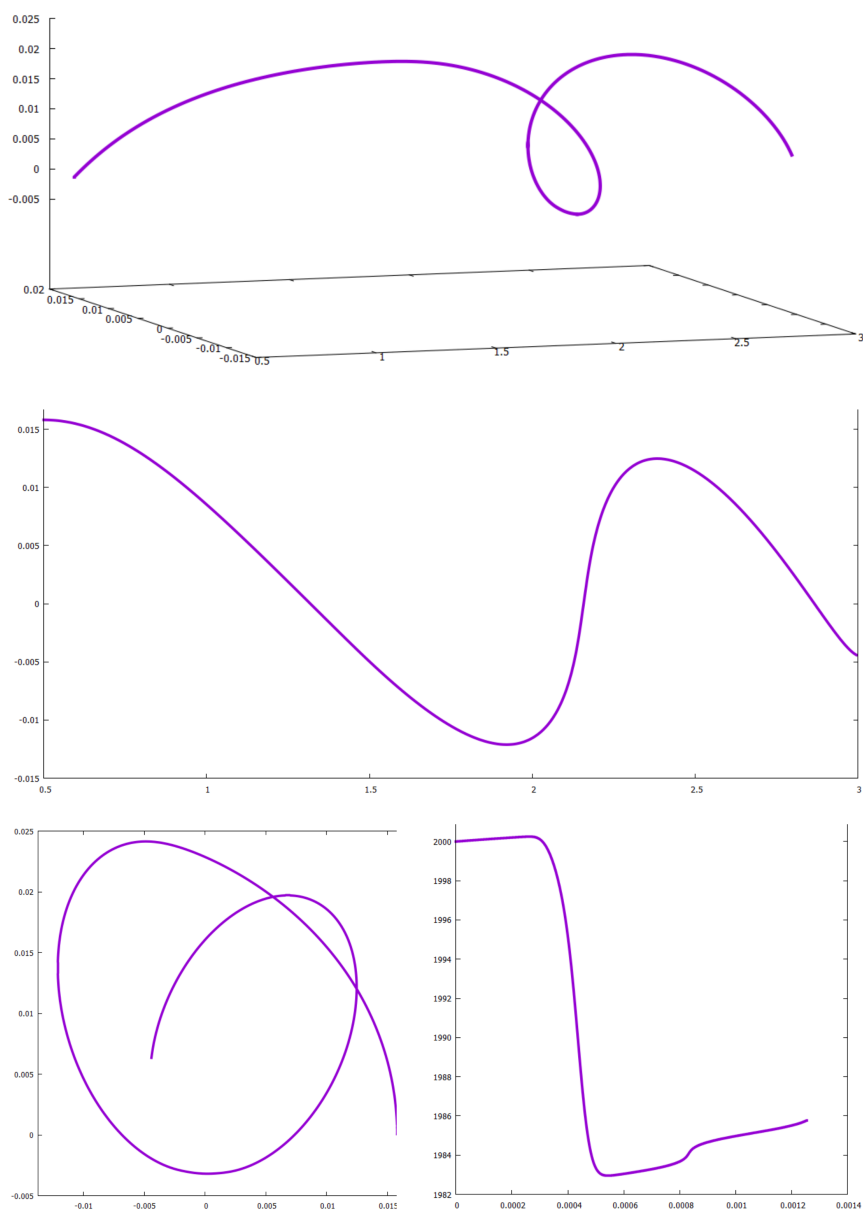
Společná legenda k následujícím obrázkům: v každé z koláží je vrchní třetina 3D graf trajektorie v osách x (ven z nákresny), y (svislá), z (vodorovná), pro přehlednost škály neodpovídají; prostřední třetina je průmět trajektorie do roviny x - z ; ve spodní třetině vlevo je průmět trajektorie do roviny x - y ; a vpravo pak závislost složky rychlosti částice rovnoběžné s osou z (tedy v_z) na čase; x - y - z a x - z grafy mají v levé části bod, kde se atom nachází na počátku simulace, pravý okraj $z = 3 \text{ m}$ potom odpovídá umístění detektoru, kam je úmysl pomocí polí atom dostat; pokud je použito elektrické pole, myslí se (5.21) s (5.28); pokud je použito magnetické pole, myslí se to převzaté z [27] na Obr. 5.2; hodnoty $x_0 = 0$, $y_0 = 0,015811 \text{ m}$, $z_0 = 0,5 \text{ m}$, $v_{x(0)} = 0 \text{ m/s}$ jsou společné všem simulacím, $v_{y(0)}$ a $v_{z(0)}$ (a jim odpovídající teplota) společně s kvantovými stavy jsou uvedeny u jednotlivých obrázků.



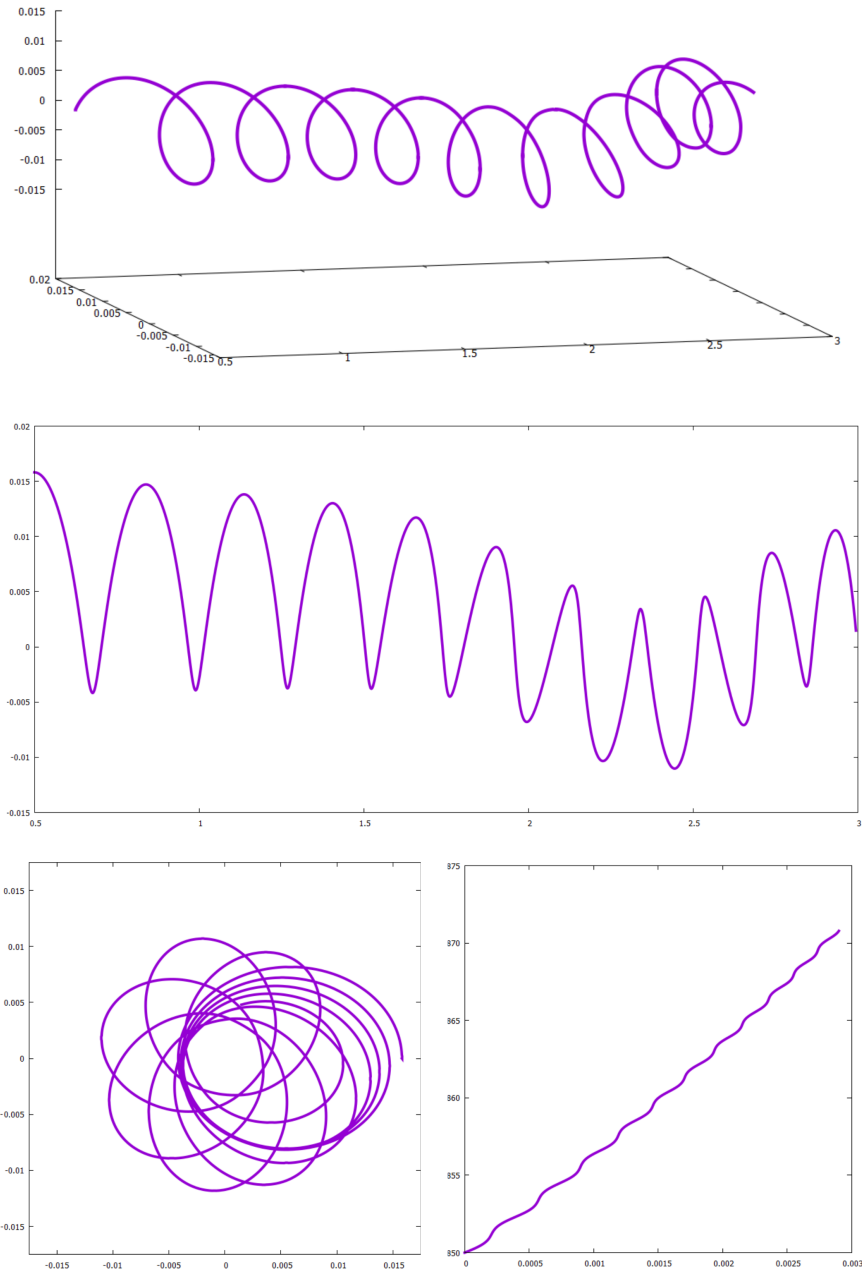
Obr. 5.4: Simulace pouze s magnetickým polem pro $n = 19$, $n_A = 4$, $n_B = 4$, $v_{y(0)} = 80$ m/s, $v_{z(0)} = 2000$ m/s ($T \cong 161,6$ K) – stejné jako v Obr. 5.5 a 5.6. Atom k detektoru nedoletí, je stržen na stěnu oblasti povoleného pohybu.



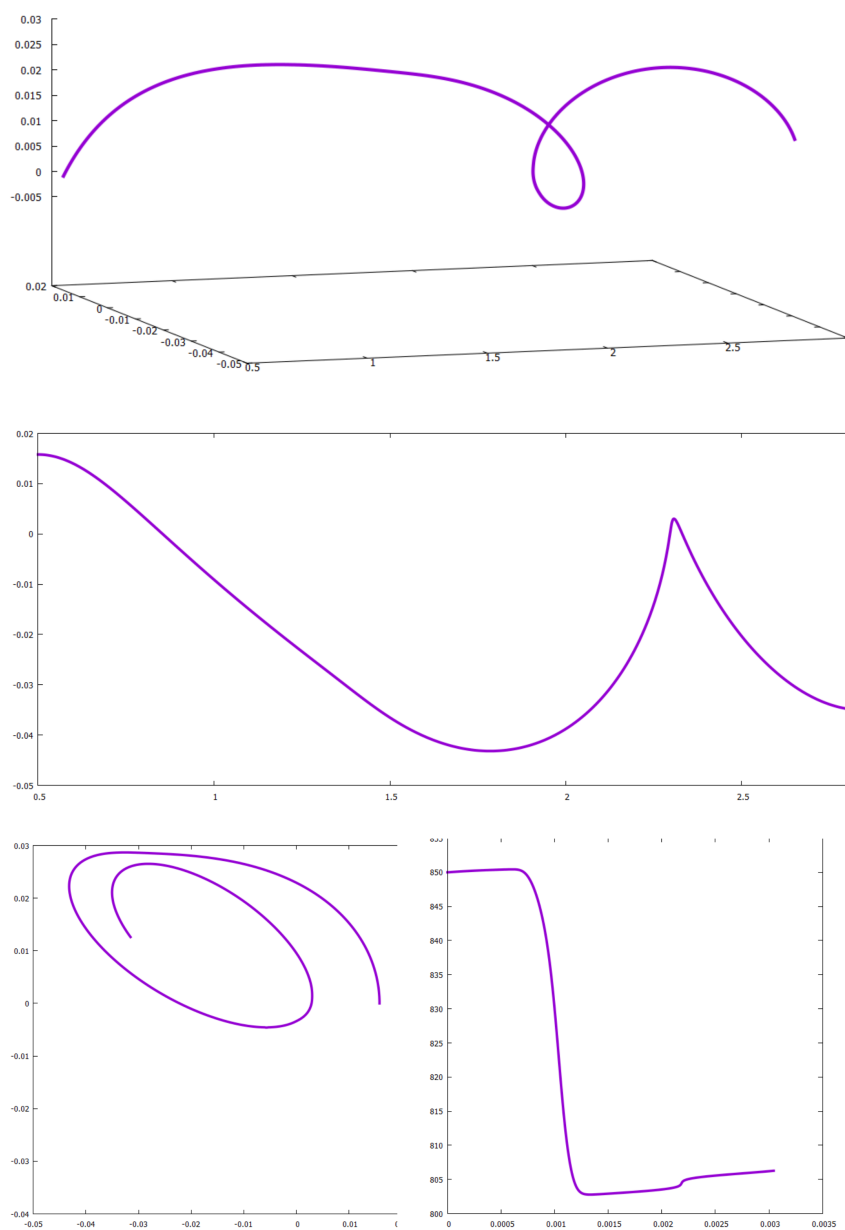
Obr. 5.5: Simulace pouze s elektrickým polem pro $n = 19$, $n_A = 4$, $n_B = 4$, $v_{y(0)} = 80$ m/s, $v_{z(0)} = 2000$ m/s ($T \cong 161,6$ K) – stejné jako v Obr. 5.4 a 5.6. Atom k detektoru doletí po deformované spirále, elektrické pole zvyšuje rychlost atomu téměř rovnoměrně, ale ne o moc.



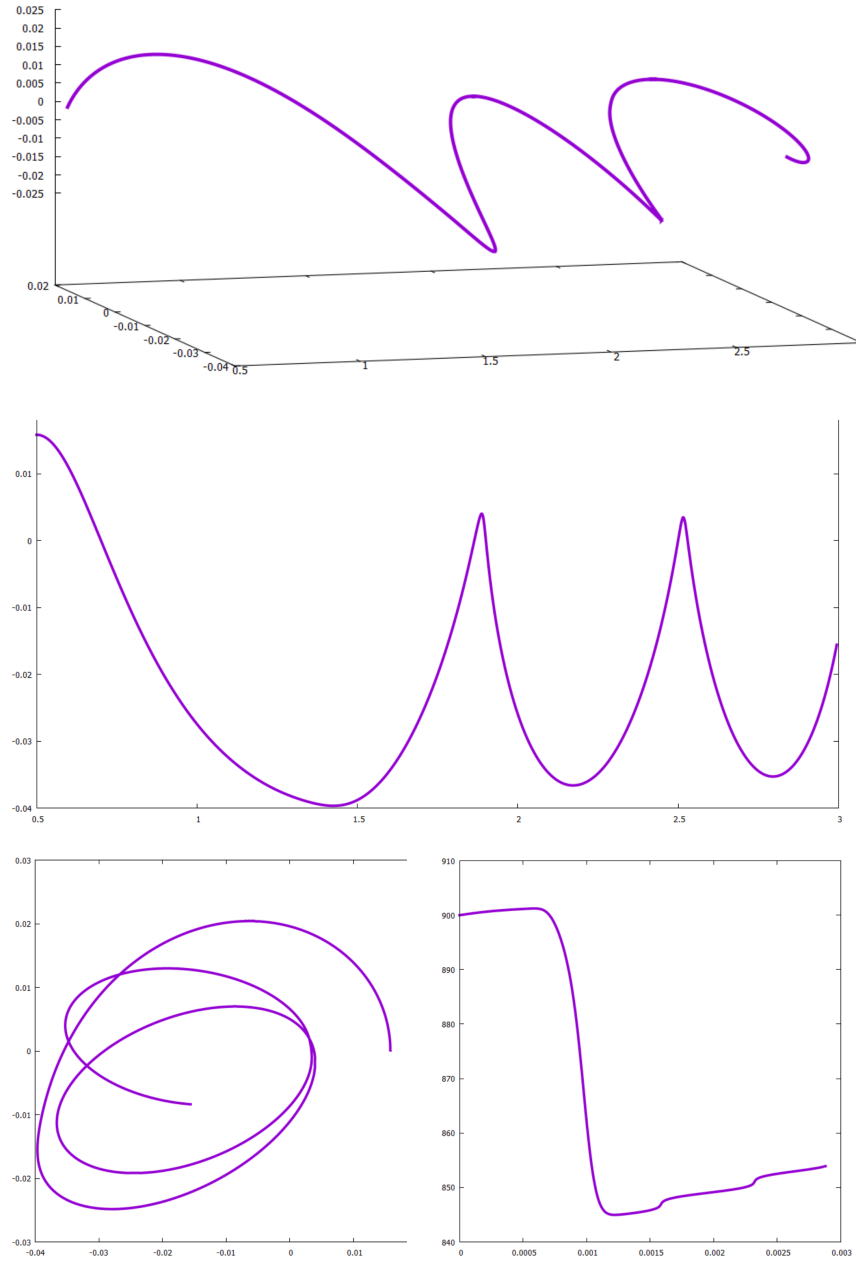
Obr. 5.6: Simulace s oběma poli pro $n = 19$, $n_A = 4$, $n_B = 4$, $v_{y(0)} = 80$ m/s, $v_{z(0)} = 2000$ m/s ($T \cong 161,6$ K) – stejné jako v Obr. 5.4 a 5.5. Atom k detektoru doletí po deformované spirále s menším množstvím period než na Obr. 5.5, rychlost atomu nejprve klesne, pak se zvyšuje jen málo.



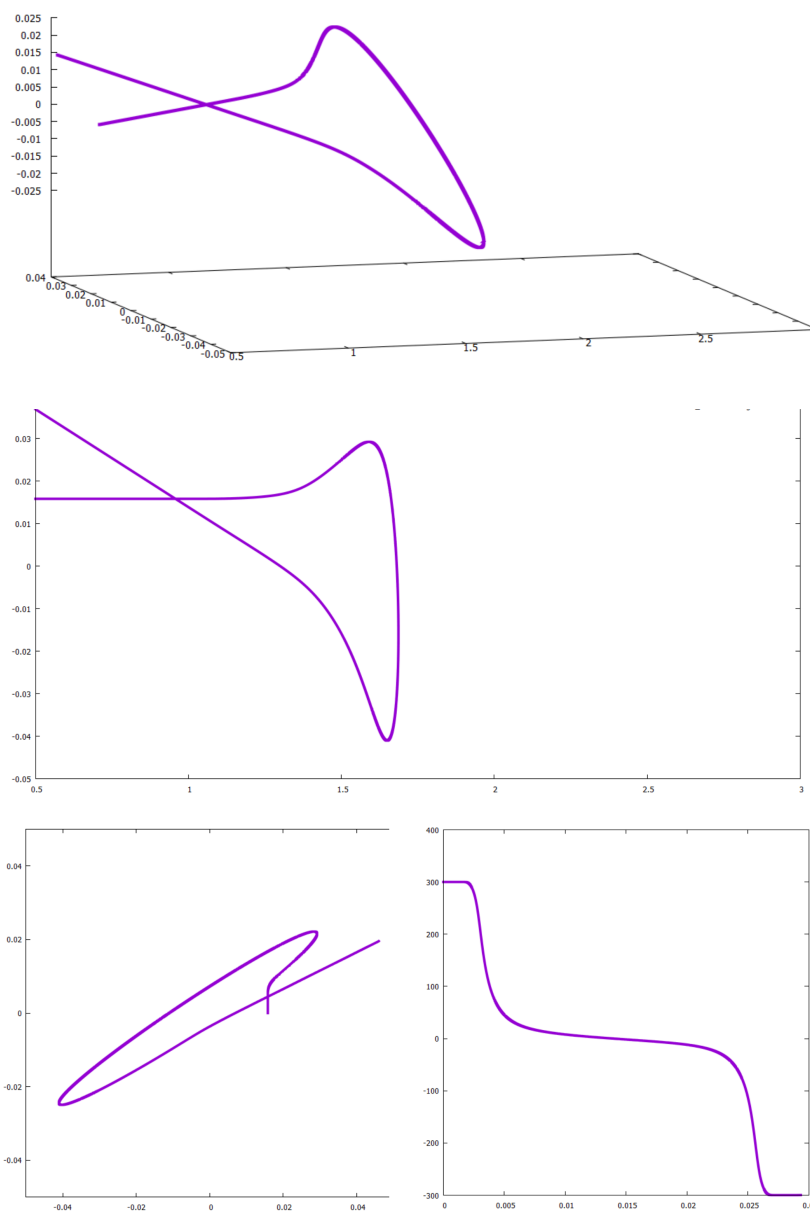
Obr. 5.7: Simulace pouze s elektrickým polem pro $n = 19$, $n_A = 4$, $n_B = 4$, $v_{y(0)} = 78$ m/s, $v_{z(0)} = 850$ m/s ($T \cong 29,4$ K) – stejné jako v Obr. 5.8. Atom k detektoru doletí po spirále, podobně jako v Obr. 5.5.



Obr. 5.8: Simulace s oběma poli pro $n = 19$, $n_A = 4$, $n_B = 4$, $v_{y(0)} = 78$ m/s, $v_{z(0)} = 850$ m/s ($T \cong 29,4$ K) – stejné jako v Obr. 5.7. Atom k detektoru doletí podobně jako v Obr. 5.6 a 5.9.



Obr. 5.9: Simulace s oběma poli pro $n = 30$, $n_A = 5,5$, $n_B = 5,5$, $v_y(0) = 78$ m/s, $v_z(0) = 850$ m/s ($T \cong 29,4$ K). Atom k detektoru doletí podobně jako v Obr. 5.6 a 5.9.



Obr. 5.10: Simulace pouze s magnetickým polem pro $n = 19$, $n_A = 4$, $n_B = 4$, $v_{y(0)} = 3$ m/s, $v_{z(0)} = 300$ m/s ($T \cong 3,6$ K) – stejné jako v Obr. 5.4. Atom k detektoru nedoletí – v místě vysokého gradientu magnetického pole (okolo $z = 1,2$ m) se směr jeho pohybu otočí a velmi blízko počátku pohybu $z = 0,5$ m vyletí z povolené oblasti.

Namátkou volené podmínky simulací dokonce ani ve vysokém počtu nemohou podat vyčerpávající zprávu o fyzikálních možnostech, určité obecné trendy ale vyslovit lze. Simulace vedou autora k následujícím interpretacím a závěrům:

- Pokud je přítomno pouze elektrické pole s gradienty podél osy z , je možné při vhodné konstelaci počátečních podmínek dosáhnout spirálovitého urychleného pohybu podél osy z ; počáteční podmínky musí spolukompenzovat vlivy gradientů kolmých k ose z .
- Za stejných počátečních podmínek, kdy se částice pohybuje v elektrickém poli podél osy z a v povoleném rozsahu, se v magnetickém poli obvykle pohybu podél osy z nedocílí. V rovině $x-y$ je trajektorie neuzavřená, jak bylo předpovězeno podle (5.27)
- Za stejných počátečních podmínek a v obou polích zároveň trajektorie kvalitativně připomíná případ v samotném elektrickém poli, magnetické pole ale výrazně oslabí akcelerační schopnost pole elektrického – přechod přes gradient magnetického pole ty testované částice, které se udrží na spirále, zpomaluje.
- Změnou kvantových čísel (pokud připouští urychlení) se dosáhne kvalitativně stejného výsledku, jen je potřeba hledat v jiném oboru počátečních podmínek.
- V samotném magnetickém poli nebyl nalezen způsob, jak by atom mohl po spirále cestovat bez omezení podél osy z . Trend se zdá být takový, že takové atomy, které se v magnetickém poli v oblasti s nízkými gradienty po křivce podobné spirále rozpohybují, jsou pak vráceny zpět v oblastech s velkými gradienty.
- Pouze pro vzácný případ přesně radiálního pohybu (takových počátečních podmínek) byly za určitých okolností v magnetickém poli pozorovány urychlené pohyby atomů podél osy z . Použití vhodného elektrického pole spolu s pevným magnetickým se zdá být nevyhnutelné.
- Posune-li se počáteční z_0 na nulovou souřadnici, kde právě bylo zamýšleno umístit oblast tvorby antivodíku a kde podle Obr. 5.2 má pole silné gradienty (a atom je tedy vnímá už na samém počátku pohybu), je rozdělení pohybů podle počátečních podmínek velmi chaotické a možné konstelace vhodných počátečních podmínek jsou velmi vzácné, existují-li.
- Důležitá je otázka antiprotonů, potažmo antivodíků – pokud je spirálovitý pohyb nutnou podmínkou transportu podél osy z , pak by při příliš nízkých teplotách nemuselo být možné zamýšlených pohybů dosáhnout.

- V praxi, tedy v samotném experimentu je samozřejmě volnost na použití jiných elektrických polí než (5.21). Jejich vhodný návrh by mohl vést k trajektoriím, kdy je antiproton více urychlen a méně negativně ovlivněn magnetickým polem. Co se ale zdá být fundamentální jako vlastnost křížných polí s válcovou symetrií, je, že atom bude vykonávat pohyb po nepravidelné spirále, tedy bez obecně předvídatelného navázání pohybu v křížných polích na gravitační vrh. Tento závěr by pro návrh experimentu mohl mít zásadní dopad – pokud by pohyb v rovině kolmé k ose z nebylo možné regulovat, mohlo by se použití například filtrů rychlostí ukázat jako nevyhnutelné.

Kapitola 6

Závěr

Shrnutí autorových původních výsledků

Autor vypracoval rešerši o rydbergovské hmotě na základě zvolených článků.

Ve vlastním bádání vycházel autor nejprve z modelu pro pohyb částice s permanentním elektrickým dipólem v elektrostatickém poli, který zkonstruoval v rámci své diplomové práce [1] a o kterém referoval [18]; model (bodové) částici předepisuje potenciální energii. Autor ukázal, že v elektrickém poli, které je přesným řešením Poissonovy rovnice v oblasti mezi sousými válcovými elektrodami, a ve vhodně zvolené souřadné soustavě je potenciální energie částice keplerovského typu.

Pro řešení problému¹, kdy je trajektorií částice uzavřená (kruhová nebo eliptická) orbita, a tedy kdy je možné částici v oblasti mezi elektrodami daným elektrostatickým polem zachytit na v principu neomezeně dlouhou dobu, autor vymyslel úspornou parametrizaci pomocí bezrozměrných veličin a v jejich řeči problém přesně vyřešil. Řešení srovnal s úvahami, jejichž platnost se zdála zřejmá bez nutnosti problém matematicky řešit, a zabýval se také problematikou vpravení částice do takové pasti.

Pro řešení pohybu dipólové částice v poli zadaném podle tzv. mapy autor odůvodnil nutnost mapu lokálně interpolovat tak, aby interpolace byla spojitá až do první derivace včetně, a jednu možnou interpolaci této podmínce vyhovují zkonstruoval.

Řešení problému zachycení a zmíněnou interpolační metodu autor zveřejnil [33].

Autor vyslovil hypotézu, do jaké (netradiční) algebraické podoby by měla jít rozložit každá a -periodická funkce s hexagonální symetrií, a tento rozklad prokázal u dvou zvolených funkcí, včetně konečného Diracova hřebenu. Motivací byla jen částečná uspokojivost popisu hexagonální symetrie pomocí dvou nezávislých směrů, jejíž nespolehlivost

¹též akceptance pasti nebo kritéria zachycení

demonstroval na transformaci funkce se čtvercovou symetrií na hexagonální podle transformace mříží.

Autor zkonstruoval reciprokou mříž pro dvourozměrný (dvourozměrně uspořádaný) objekt v třírozměrném prostoru z krystalografické definice a (nezávisle) z požadavků symetrie a periodicity.

Posloupnost magických čísel počtu atomů v clusteru rydbergovské hmoty odvodil autor několika nezávislými způsoby.

Autor se zabýval multiplicitou, pro jejíž výpočet sestavil algoritmus. Ve výstupech objevil motiv součinů opakujících se magických čísel.

Autor upozornil na úskalí studia difrakčního spektra clusterů rydbergovské hmoty a navrhl, jak toto spektrum experimentálně měřit tak, aby bylo jednak netriviální a jednak získatelné i méně energetickým zářením, než je rentgenové.

Autor sestavil a vyřešil model částice v potenciálové jámě konečné hloubky, jejíž šířka se mění s kvantovým stavem částice.

Přesné vodíkové vlnové funkce pro vysoké momenty hybnosti autor nahradil zjednodušenými funkcemi, které normalizoval a otestoval, nakolik vodíkovému hamiltonánu vyhovují.

Autor sestavil Roothaanovu maticovou rovnici pro LCAO přiblížení nejmenšího clusteru rydbergovské hmoty a tu podle úvah o symetrii přesně vyřešil v závislosti na maticových elementech. Ty odhadl podle aproximovaných vodíkových vlnových funkcí a v prvním přiblížení vypočítal energetické spektrum tohoto clusteru.

Autor našel přesné partikulární řešení Poissonovy rovnice ve válcových souřadnicích s gradienty ve směru osy válcové symetrie jako modelové pole pro studium možností urychlování atomů antivodíku v křížných polích.

V podmínkách experimentu AEGIS a podle pohybové rovnice pro atom antivodíku v křížných polích (s magnetickým polem převzatým od experimentu a elektrickým polem uvedeným v předchozím odstavci), kterou autor zavedl už v rámci své diplomové práce, studoval autor pohyby antivodíku pomocí simulačního programu, kterého je spoluautorem. Autor vyslovil domněnky o zákonitostech pohybu antiatomů v experimentální aparatuře.

Autorův podíl v experimentu AEGIS předložený v této dizertaci je publikovaný v [29, 30].

Dosažené výsledky

První část práce vychází z modelu částice s permanentním elektrickým dipólem $\vec{\mu}_e$, který autor zkonstruoval ve své diplomové práci [1] a je o něm pojednáno i v článku [18]. V tomto modelu je eliminována momentová rovnice a částice s elektrickým dipólem je tedy efektivně bodová, tedy její pohyb ve vnějším poli se řídí druhým Newtonovým zákonem jako $M\ddot{\vec{R}} = -\vec{\nabla}W_p$, kde W_p je potenciální energie elektrického dipólu ve vnějším poli, která na lokální elektrické intenzitě a projekci $\mu_{e(E)}$ dipólu do tohoto směru závisí jako

$$W_p = \mu_{e(E)} \left| \vec{E}(\vec{R}) \right|. \quad (\text{Z.1})$$

Projekce $\mu_{e(E)}$ je například u atomu vodíku kvantována jako $\frac{3}{2}ea_0np$ [19, 20], kde e je elementární náboj, a_0 je Bohrov poloměr, n hlavní kvantové číslo a p tzv. parabolické kvantové číslo, jak plyne z analýzy Starkova jevu [1, 20].

Dvě sousedé válcové elektrody o poloměrech r_{in} a r_{out} a potenciálech Φ_{in} a Φ_{out} budí v prostoru mezi sebou podle Poissonovy rovnice $0 = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2}$ pole

$$\Phi(r) = \frac{\ln \frac{r}{r_{\text{in}}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} (\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}) + \Phi_{\text{in}}, \quad (\text{Z.2})$$

které závisí jen na radiální souřadnici válcové soustavy. Z důvodu vysoké symetrie – $\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = 0$ a $\frac{\partial \Phi}{\partial z} = 0$ – je jediná nenulová složka elektrické intenzity ta radiální,

$$E_r = -\frac{\partial \Phi}{\partial r} = -\frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \cdot \frac{1}{r}, \quad (\text{Z.3})$$

a potenciální energie dipólové částice v něm je

$$W_p = \mu_{e(E)} \left| \frac{\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} \right| \cdot \frac{1}{r}, \quad (\text{Z.4})$$

která určitě pro některé projekce $\mu_{e(E)}$ má keplerovskou formu $-\frac{\tilde{\kappa}}{r}$, $\kappa > 0$, kde souřadnice r je ovšem cylindrická. Aby bylo možné keplerovský pohyb řádně vyšetřit (aby se zachovával moment hybnosti nebo – ekvivalentně – aby vektory $\vec{v}_0$, $\vec{r}_0$ a $\vec{F}$ ležely v jedné rovině), stačí pohyb vyšetřovat v soustavě, kde se neděje pohyb podél válcové osy ($\vec{v}_{0(z)} = 0$). Potom standardní vyšetření trajektorie [21] vede na rovnici kuželosečky.

Autor si kladl otázku, kdy je trajektorií kružnice nebo elipsa, která se celá vejde do prostoru mezi elektrodami ($r_{\text{in}} < r_{\text{min}} \leq r_{\text{max}} < r_{\text{out}}$, kde r_{min} a r_{max} jsou apsidy trajektorie), tedy kdy je v prostoru mezi elektrodami možné částici s permanentním elektrickým dipólem zachytit na v principu neomezeně dlouhou dobu. Problém zřejmě

závisí na devíti a více parametrech – hmotnosti částice M , její počáteční rychlosti $v_{0(xy)}^2$, počáteční radiální souřadnici r_0 , počátečním směru pohybu $\beta_0 \equiv \angle(\vec{r}_0, \vec{v}_{0(xy)})$, parametrech pasti $r_{\text{in}}, r_{\text{out}}, \Phi_{\text{in}}, r_{\text{out}}$ a kvantovém stavu, tedy $\mu_{e(E)}$. Zavedou-li se bezrozměrné

$$\rho \equiv \frac{r_{\text{in}}}{r_0} \quad (\text{Z.5a})$$

$$R \equiv \frac{r_{\text{out}}}{r_0} \quad (\text{Z.5b})$$

$$\eta_0 \equiv \frac{|W_{p0}|}{W_{k0}}, \quad (\text{Z.5c})$$

kde $W_{k0} \geq 0$ je počáteční kinetická energie částice a $W_{p0} < 0^3$ je potenciální energie částice na počátku pohybu, redukuje se úloha z devíti parametrů na čtyři – ρ, R, η_0 a $\sin \beta_0$. V jejich řeči je část diagramu $\sin \beta_0$ - η_0 odpovídající úspěšnému zachycení dána průnikem tří oblastí

$$\eta_0 < \frac{1}{\rho(1-\rho)} \sin^2 \beta_0 - \frac{\rho}{1-\rho}, \quad (\text{Z.6a})$$

$$\eta_0 > -\frac{1}{R(R-1)} \sin^2 \beta_0 + \frac{R}{(R-1)}, \quad (\text{Z.6b})$$

$$\sin \beta_0 \leq 1. \quad (\text{Z.6c})$$

Oblast vždy obsahuje bod $\sin \beta_0 = 1, \eta_0 = 2$, která odpovídá kruhové orbitě, což souhlasí s intuitivním předpokladem, že pro $r_{\text{out}} \rightarrow r_{\text{in}}, r_{\text{out}} > r_{\text{in}}$ prostor na kruhovou orbitu při vhodných počátečních podmínkách zbývat musí. Zároveň se ukazuje jako komplikované přivést do pasti částici zvnějšku skrze povrch elektrody, protože částice by na jiném místě musela na elektrodu narazit; pokud by dipólové částice v prostoru pastí přímo vznikaly⁴, například nábojovou výměnou nebo kondenzací, tato potíž by odpadla.

Protože síla na částici s permanentním elektrickým dipólem ve vnějším elektrostatickém poli závisí na prostorových derivacích složek vektoru $\vec{E}(\vec{R})$, nestačí pole, je-li zadáno tzv. mapou, tedy ve vybraných izolovaných bodech, interpolovat mezi těmito body lineárně, protože pak není zaručena spojitá návaznost derivací a v numerických simulacích se objevují perturbace vedoucí k nefyzikálním výsledkům. Pokud je pro jednoduchost pole dáno jednou složkou závislou na jedné proměnné, tj. $E = E(X)$, a zadáno mapou v ekvidistantních bodech X_n , lze spojitosti první derivace ve všech bodech dosáhnout, předepíše-li se v bodě X_n interpolující křivce derivace rovná

²v soustavě, kde $v_{0(z)} = 0$

³jen záporné mohou vést na uzavřenou orbitu

⁴pak by počáteční podmínky jejich pohybu byly počáteční doslova

$\frac{E_{n+1}-E_{n-1}}{2\Delta X}$, kde ΔX je vzdálenost mezi uzly polní mapy. Potom je derivace v tomto bodě stejná počítána pro interval $\langle X_{n-1}, X_n \rangle$ i $\langle X_n, X_{n+1} \rangle$ a v bodě X_n navazuje spojitě. Interpolace uvnitř intervalu respektující tyto derivace na okrajích a spojitá uvnitř něj i v první derivaci pak bude přirozeně spojitá i na okrajích. V první a poslední čtvrtině intervalu se může interpolace provést úseky přímk o směrnicích $\frac{E_{n+1}-E_{n-1}}{2\Delta X}$ a procházejících body $(X_n, E_n)^T$ – pak je hned pro polovinu bodů možné vyhnout se složité interpolaci například polynomem vyššího stupně, který samozřejmě musí úseky přímk navazovat v prostřední polovině intervalu. Interpolace je pak dána jako

$$E(X) = \begin{cases} a_L X + b_L, & X \in \langle X_n, X_n + \frac{\Delta X}{4} \rangle \\ aX^3 + bX^2 + cX + d, & X \in \langle X_n + \frac{\Delta X}{4}, X_{n+1} - \frac{\Delta X}{4} \rangle \\ a_R X + b_R, & X \in \langle X_{n+1} - \frac{\Delta X}{4}, X_{n+1} \rangle \end{cases} \quad (Z.7)$$

kde

$$a_L = \frac{X_{n+1} - X_{n-1}}{2\Delta X} \quad (Z.8a)$$

$$b_L = E_n - \frac{E_{n+1} - E_{n-1}}{2\Delta} (X_{n-1} + \Delta X) \quad (Z.8b)$$

$$a = \frac{4}{(\Delta X)^3} (E_{n+2} - 3E_{n+1} + 3E_n - E_{n-1}) \quad (Z.8c)$$

$$b = \frac{1}{2(\Delta X)^2} (3E_{n+2} - 7E_{n+1} + 5E_n - E_{n-1}) + \frac{1}{(\Delta X)^3} (12X_{n-1} + 19\Delta X) (E_{n-1} - 3E_n + 3E_{n+1} - E_{n+2}) \quad (Z.8d)$$

$$c = \frac{E_{n+2} - E_n}{2\Delta X} + \frac{1}{4(\Delta X)^2} (4X_{n-1} + 7\Delta X) (E_{n-1} - 5E_n + 7E_{n+1} - 3E_{n+2}) + \frac{1}{4(\Delta X)^3} (4X_{n-1} + 7\Delta X) (12X_{n-1} + 17\Delta X) (E_{n+2} - 3E_{n+1} + 3E_n - E_{n-1}) \quad (Z.8e)$$

$$d = E_{n+1} + (X_{n-1} + 2\Delta X) \frac{E_n - E_{n+2}}{2\Delta X} + \frac{1}{32(\Delta X)^2} (4X_{n-1} + 7\Delta X)^2 (3E_{n+2} - 7E_{n+1} + 5E_n - E_{n-1}) + \frac{1}{16(\Delta X)^3} (4X_{n-1} + 5\Delta X) (4X_{n-1} + 7\Delta X)^2 (E_{n-1} - 3E_n + 3E_{n+1} - E_{n+2}) \quad (Z.8f)$$

$$a_R = \frac{X_{n+2} - X_n}{2\Delta X} \quad (Z.8g)$$

$$b_R = E_{n+1} - \frac{E_{n+2} - E_n}{2\Delta X} (X_{n-1} + 2\Delta X). \quad (Z.8h)$$

Rozšíření na funkce více proměnných lze dosáhnout podobně jako v algoritmech "Particle in Cell".

Sudá funkce jedné proměnné s periodou a lze rozložit do Fourierovy řady

$$n(x) = \sum_{G \in M_a} \tilde{C}_G \cos Gx, \quad (\text{Z.9a})$$

$$\tilde{C}_G = \frac{2}{a} \int_0^{+\frac{a}{2}} n(x') \cos Gx' dx', \quad (\text{Z.9b})$$

kde $M_a = \{G = \frac{2\pi}{a}k \mid k \in \mathbb{Z}\}$ je tzv. reciproká množina/mříž společná všem funkcím s periodou a . Lze očekávat, že sudou funkcí s periodou a bude hustota elektronů v homogenním lineárním krystalu, ať konečném⁵ nebo nekonečném. Modelovou funkcí může být například

$$n(x) = \left(\cos \frac{\pi x}{a} \right)^2. \quad (\text{Z.10})$$

Rozmístění jader v konečném lineárním krystalu může popisovat konečný Diracův hřeben

$$\tilde{D}(x) \equiv \sum_{N=-P}^{+P} \delta(x - Na), \quad (\text{Z.11})$$

jehož Fourierovou transformací je

$$\mathcal{F}[\tilde{D}(x)](\Lambda) (e^{-ia\Lambda})^P \cdot \frac{\sin(P + \frac{1}{2})a\Lambda}{\sin \frac{1}{2}a\Lambda}. \quad (\text{Z.12})$$

Kvadrát

$$F^2(\Lambda) = \frac{\sin^2(N + \frac{1}{2})a\Lambda}{\sin^2 \frac{1}{2}a\Lambda}, \quad (\text{Z.13})$$

což je $\frac{2\pi}{a}$ -periodická funkce, pak má fyzikální význam při difrakci záření na tomto krystalu.

Cluster rydbergovské hmoty je konečné dvourozměrné uspořádání atomů s periodou a a s hexagonální symetrií. Podobnou symetrii, pokud je rozložení atomů homogenní, by měla mít i hustota elektronů. Zobecněním sudé funkce v případě homogenního lineárního krystalu je a -periodická hexagonálně symetrická funkce: má periodu a ve směrech svírajících úhly $\frac{2\pi}{3}$ a je invariantní vůči rotaci o úhel $\frac{\pi}{3}$ okolo počátku.

⁵v tom případě periodickou alespoň na nějaké oblasti

Rovinná hexagonální symetrie je v lecčem neintuitivní právě kvůli kontrastu, že nezávislé směry jsou dva, ale význačné směry symetrie jsou tři. Tento kontrast je dobře ilustrován na transformaci

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x - \frac{\sqrt{3}}{3}y \\ \frac{2\sqrt{3}}{3}y \end{pmatrix}, \quad (\text{Z.14})$$

která ze čtvercové reciproké mříže

$$M_a = \left\{ \vec{G} = \frac{2\pi}{a} (k\vec{e}_x + l\vec{e}_y) \mid k, l \in \mathbb{Z}^2 \right\} \quad (\text{Z.15})$$

vytvoří správnou reciprokou mříž k funkcím s hexagonální symetrií

$$M_a = \left\{ \vec{G} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(k \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}^T + l \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}^T \right) \mid k, l \in \mathbb{Z}^2 \right\}, \quad (\text{Z.16})$$

ale touto transformací z funkce se čtvercovou symetrií funkce se symetrií hexagonální nevznikne, protože třetí význačný směr není explicitně zahrnut. Jsou-li dva význačné směry $\vec{G}_1$ a $\vec{G}_2$ zvoleny tak, že svírají úhel $\frac{2\pi}{3}$ a jsou spojeny rotací⁶ $R_{(3)}$ právě o tento úhel (tedy např. $\vec{G}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)^T$ a $\vec{G}_2 = (0, 1)^T$), pak lze třetí zvolit jako $-\vec{G}_1 - \vec{G}_2$; součet všech tří je tedy nulový vektor a (modelovým) příkladem a -periodické funkce se správnou hexagonální symetrií je

$$n(\vec{r}) = \left(\cos \frac{\vec{G}_1}{2} \cdot \vec{r} \right)^2 \left(\cos \frac{\vec{G}_2}{2} \cdot \vec{r} \right)^2 \left(\cos \frac{-\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2} \cdot \vec{r} \right)^2. \quad (\text{Z.17})$$

Při inspiraci sudými funkcemi jedné proměnné s periodou a lze očekávat, že i a -periodická funkce s hexagonální symetrií lze vyjádřit také jen pomocí kosinů; stejné očekávání vzbuzuje i identita

$$\sum_{\vec{G} \in M_a} \tilde{C}_{\vec{G}} \cos \vec{G}\vec{r} = \sum_{\vec{G}(k\vec{G}_1 + l\vec{G}_2, k, l \in \mathbb{Z}^2) \in M_a} \tilde{C}_{\vec{G}} \cos k\vec{G}_1\vec{r} \cos l\vec{G}_2\vec{r} \quad (\text{Z.18})$$

Vzhledem k algebraickému tvaru modelové funkce (Z.17) lze navíc očekávat, že kosiny se v rozkladu budou vyskytovat v (poměrně neobvyklém) trojitém součinu.

⁶maticí rotace

Definuje-li se

$$\cos_{(3)}(\vec{r}; \vec{G}_A) \equiv \cos(\vec{G}_A \cdot \vec{r}) \cos(R_{(3)}(\vec{G}_A) \cdot \vec{r}) \cos(R_{(3)}^2(\vec{G}_A) \cdot \vec{r}), \quad (\text{Z.19})$$

a

$$M_a^{(6)} \equiv \{\vec{0}\} \cup \{\vec{G} = k\vec{G}_1 + l\vec{G}_2 | k > 0, l \leq 0\}, \quad (\text{Z.20})$$

tedy sextant reciproké roviny a nulový vektor, je vyslovena hypotéza, že každá a -periodická funkce s hexagonální symetrií se dá rozložit jako

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G} \in M_a^{(6)}} \tilde{C}_{\vec{G}} \cos_{(3)}\left(\vec{r}; \frac{\vec{G}}{2}\right). \quad (\text{Z.21})$$

Hypotéza nebyla v práci dokazována, ale doložena na přesném rozkladu dvou vybraných funkcí – modelové funkce (Z.17) a Fourierova obrazu konečného a -periodického Diracova hřebenu s hexagonální symetrií. V případě prvně jmenované je

$$\begin{aligned} n(\vec{r}) &= \left(\cos \frac{\vec{G}_1 \cdot \vec{r}}{2}\right)^2 \left(\cos \frac{\vec{G}_2 \cdot \vec{r}}{2}\right)^2 \left(\cos \frac{(-\vec{G}_1 - \vec{G}_2) \cdot \vec{r}}{2}\right)^2 = \\ &= -\frac{1}{8} + \frac{3}{4} \cos_{(3)}\left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1}{2}\right) + \frac{1}{8} \cos_{(3)}\left(\vec{r}; 2\frac{\vec{G}_1}{2}\right) + \frac{1}{4} \cos_{(3)}\left(\vec{r}; \frac{\vec{G}_1 - \vec{G}_2}{2}\right), \end{aligned} \quad (\text{Z.22})$$

zatímco pro druhý (s prohozením rolí $\vec{r}$ a $\vec{G}^7$) vychází

$$\mathcal{F}\left[D_V^{(6)}\right](\vec{\Lambda}) = -1 + V(V+1) + 8 \sum_{\vec{R} \in \tilde{M}_a^{(6)}} \cos_{(3)}\left(\vec{\Lambda}; \frac{\vec{R}}{2}\right), \quad (\text{Z.23})$$

kde

$$\tilde{M}_a^{(6)} \equiv \{\vec{0}\} \cup \{\vec{R} = K\vec{e}_K + L\vec{e}_L | K > 0, L \geq 0\}. \quad (\text{Z.24})$$

Počet uzlů v clusteru tvaru úplného pravidelného šestiúhelníku je

$$\#_V = 3V^2 + 3V + 1. \quad (\text{Z.25})$$

⁷jsou matematicky záměnné a také platí, že reciproká mříž k reciproké je opět přímá

Pro přímku v rovině clusteru, která prochází jeho středem a je kolmá k vektoru reciproké mříže $\vec{G}_{k,l}$, je bod přímé mříže na ní ležící a nejbližší k počátku (ale od něj různý) dán jako⁸

$$\vec{R} = a \left(\frac{l}{D_{k,l}} (1, 0)^T - \frac{k}{D_{k,l}} \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)^T \right), \quad (\text{Z.26})$$

kde $D_{k,l}$ je největší společný dělitel čísel $|k|$ a $|l|$, pokud jsou nenulová, popř. $D_{k,l} \equiv \max\{|k|, |l|\}$, pokud je jedno z nich nulové⁹. Bod může pro rovinné útvary malé velikosti sloužit jako alternativní indexace reflexních nadrovin k tzv. Millerovým indexům. Počet přímek kolmých k $\vec{G}_{k,l}$, které protnou šestiúhelník clusteru o velikosti V , je

$$2v_{k,l}V + 1, \quad (\text{Z.27})$$

kde $v_{k,l} \equiv \max\{|k|, |l|, |k-l|\}$. Difrakční spektrum na clusteru o periodě a se zářením o vlnové délce λ vzniká jen pro omezenou množinu k a l :

$$-\frac{2a}{\lambda} \leq l \leq +\frac{2a}{\lambda} \quad (\text{Z.28a})$$

$$+\frac{l}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \sqrt{\left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 - l^2} \leq k \leq +\frac{l}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \sqrt{\left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 - l^2} \quad (\text{Z.28b})$$

Algoritmus v počítači odhalí, že některé multiplicity $m_{(6)}$ se (alespoň do testované meze) vůbec nevyskytují, zatímco první výskyt příhodných nastává pro takové $k^2 - kl + l^2$, které jsou součiny magických a polomagických čísel:

$m_{(6)} = 6$	$N_{\min} = 1$	$m_{(6)} = 48$	$N_{\min} = 1729 = 7 \cdot 13 \cdot 19$
$m_{(6)} = 12$	$N_{\min} = 7$	$m_{(6)} = 54$	$N_{\min} = 8281 = 7 \cdot 7 \cdot 13 \cdot 13$
$m_{(6)} = 18$	$N_{\min} = 49 = 7 \cdot 7$	$m_{(6)} = 60$	nevyskytují se
$m_{(6)} = 24$	$N_{\min} = 91 = 7 \cdot 13$	$m_{(6)} = 66$	nevyskytují se
$m_{(6)} = 30$	nevyskytují se	$m_{(6)} = 72$	$N_{\min} = 12103 = 7 \cdot 7 \cdot 13 \cdot 19$
$m_{(6)} = 36$	$N_{\min} = 637 = 7 \cdot 7 \cdot 13$	$m_{(6)} = 78$	nevyskytují se
$m_{(6)} = 42$	nevyskytují se	$m_{(6)} = 84$	nevyskytují se
		$m_{(6)} = 90$	nevyskytují se
		$m_{(6)} = 96$	$N_{\min} = 53599 = 7 \cdot 13 \cdot 19 \cdot 31$

⁸takové body jsou dva: $\vec{R}$ a $-\vec{R}$

⁹pro $k = l = 0$ se bod nejbližší k počátku nedefinuje

Multiplicita $m_{(6)}$ je počet navzájem různých tříd rovnoběžných (nad)rovin, které mají stejnou vzdálenost mezi sousedními v dané třídě – ta je rovna $d_{(k,l)} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{k^2 - kl + l^2}}$. Multiplicita je tedy rovna počtu všech kombinací k a l , které dají stejné číslo $k^2 - kl + l^2$ – zřejmě kromě $k = l = 0$ bude násobkem šesti a stačí ji tedy vyšetřovat jen v (Z.20).

Clustery obecné orientace volně se vznášející v prostoru budou mít triviální difrakční obrazec: difrakce se bude dít do libovolného směru, protože kromě úhlů jejich natočení je spojitá i jejich reciproká mřížka – pro dvourozměrný útvar v třírozměrném prostoru se jedná o soubor přímek kolmých k rovině útvaru. Pokud se ale clustery spojí do vláken, jejichž vzájemná vzdálenost $d_{\text{par.}}$ bude menší než mřížková konstanta a v rovině clusteru, pak záření vlnové délky $\lambda \in \langle 2d_{\text{par.}}, \sqrt{3}a \rangle$ zobrazí i v třírozměrném prostoru strukturu dvourozměrného uspořádání. Záření by odpovídalo infračervenému nebo viditelnému oboru spektra. Při změně vlnové délky by mohlo dojít ke kvalitativnímu skoku v podobě spektra, což by mohlo přítomnost vláken odhalit.

Pokud jednorozměrná potenciálová jáma konečné hloubky $V_0 < 0$ mění svoji šíři s kvantovým číslem n částice o hmotnosti M v ní zachycené jako

$$L_n = L_\infty + \frac{L_1 - L_\infty}{n} \quad (\text{Z.29})$$

pro $L_1 > L_\infty \gg \sqrt{\frac{2}{\frac{(-V_0)}{Mc^2}}} \cdot \Lambda_C \cdot \frac{\pi}{2}$, pak jsou energie částice v prvním přiblížení

$$W_n = V_0 \left(1 - \frac{\pi^2}{4} \cdot \frac{1}{\left(1 + \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{(-V_0)}{Mc^2}} \cdot \frac{L_\infty}{\Lambda_C} \cdot \left(1 + \frac{L_1 - L_\infty}{n} \right) \right)^2} \right); \quad (\text{Z.30})$$

model je demonstrací systému, jehož parametry se výrazně mění spolu s kvantovým stavem, tak jak je tomu u rydbergovské hmoty.

Vodíkové vlnové funkce pro $l = n - 1$ a $m = \pm(n - 1)$ mají jednoduchou formu:

$$\psi_{n,n-1,|n-1|}(r, \theta, \varphi) = R_n(r) \Theta_n(\theta) \Phi_n(\varphi), \quad (\text{Z.31})$$

$$R_n(r) \equiv C_n^{(r)} r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}} = \left(\frac{2}{na_0} \right)^n \sqrt{\frac{2}{na_0}} \cdot \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \cdot r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}}, \quad (\text{Z.32a})$$

$$\Theta_n(\theta) \equiv C_n^{(\theta)} \sin^{n-1} \theta = \frac{1}{2^n (n-1)!} \cdot \sqrt{\frac{(2n)!}{n}} \cdot \sin^{n-1} \theta, \quad (\text{Z.32b})$$

$$\Phi_n(\varphi) = C_n^{(\varphi)} e^{-i(n-1)\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-i(n-1)\varphi}. \quad (\text{Z.32c})$$

Pro vysoká n se první dvě funkce v (Z.32) dají pěkně odhadnout Gaussovými funkcemi s pološířkami $\Delta_n^{(r)} = 2 \cdot \sqrt{2 \ln 2} \cdot a_0 \cdot n^{\frac{3}{2}}$, respektive $\Delta_n^{(\theta)} = 2 \cdot \sqrt{\frac{2 \ln 2}{n}}$ a třetí položit rovná konstantě. Celá vlnová funkce se pak dá nahradit funkcí, která je konstantní v oblasti průniků pološířek, tedy

$$\tilde{\psi}_n(r, \theta) = \begin{cases} C, (r, \theta) \in \left\langle r_n - \frac{\Delta_n^{(r)}}{2}, r_n + \frac{\Delta_n^{(r)}}{2} \right\rangle \times \left\langle \frac{\pi}{2} - \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2}, \frac{\pi}{2} + \frac{\Delta_n^{(\theta)}}{2} \right\rangle \\ 0 \text{ jinak} \end{cases}, \quad (\text{Z.33})$$

kde z normalizace plyne

$$|C|^2 = \frac{1}{2\pi r_n^2 \Delta_n^{(r)} \Delta_n^{(\theta)}} = \frac{1}{16\pi \ln 2 \cdot a_0^3 \cdot n^5}. \quad (\text{Z.34})$$

Funkce mají sice nulový gradient, ale s využitím virálového $\langle \tilde{\psi}_n | W_k | \tilde{\psi}_n \rangle = \langle \tilde{\psi}_n | \frac{W_p}{2} | \tilde{\psi}_n \rangle$ v nejvyšší mocnině n vychází

$$\langle \tilde{\psi}_n | H | \tilde{\psi}_n \rangle = -\frac{1}{2} m c^2 \alpha^2 \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{R_\infty}{n^2}, \quad (\text{Z.35})$$

tedy náhradu $\psi_{n,n-1,\pm(n-1)} \rightarrow \tilde{\psi}_n$ lze považovat za uspokojivou.

Každý z atomů zvlášť má energii $\tilde{W}_n$, ale celý cluster interagujících atomů má spektrum jiné – W_n . Předpokládá-li se ve vodíkovém clusteru o sedmi atomech pouze interakce mezi sousedními atomy a výsledná vlnová funkce jako lineární kombinace dílčích atomových orbitalů (LCAO), tj. $\psi_n = \sum_{i=0}^6 c_i \tilde{\psi}_{i(n)}$, je vzájemná interakce vyjádřena maticovou (Roothaanovou) rovnicí

$$\begin{pmatrix} A & C & C & C & C & C & C \\ C & B & C & 0 & 0 & 0 & C \\ C & C & B & C & 0 & 0 & 0 \\ C & 0 & C & B & C & 0 & 0 \\ C & 0 & 0 & C & B & C & 0 \\ C & 0 & 0 & 0 & C & B & C \\ C & C & 0 & 0 & 0 & C & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \\ c_6 \end{pmatrix} = 0, \quad (\text{Z.36})$$

kde $A = (\tilde{W}_n - W_n) + 6Y$, $B = (\tilde{W}_n - W_n) + 3Y$, $C = (\tilde{W}_n - W_n)S + Y$ a kde $S \equiv \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle$ je tzv. překryvový integrál sousedních atomů a $Y \equiv -m c^2 \cdot \alpha \Lambda_C \cdot \langle \tilde{\psi}_{0(n)} | \frac{1}{r} | \tilde{\psi}_{1(n)} \rangle$ je tzv. coulombický integrál (sousedních atomů).

Z vlastností šesterečné symetrie jde úloha (Z.36) v řeči A , B a C vyřešit přesně – energie W_n jsou řešeními rovnic

$$B = C, \quad (\text{Z.37a})$$

$$B = -C, \quad (\text{Z.37b})$$

$$B = 2C, \quad (\text{Z.37c})$$

$$6C^2 - 2AC - AB = 0, \quad (\text{Z.37d})$$

a odhadne-li se $S \ll 1$, jsou hodnoty molekulárního spektra clusteru W_n pro dané n (včetně vyznačených degenerací) po řadě

$$\tilde{W}_n + Y > \tilde{W}_n + 2Y \text{ (2x)} > \tilde{W}_n + 3Y > \tilde{W}_n + 4Y \text{ (2x)} > \tilde{W}_n + 8Y \quad (\text{Z.38})$$

a celková výsledná energie clusteru

$$W_n = 7 \left(\tilde{W}_n + 5Y \right). \quad (\text{Z.39})$$

Coulombický integrál Y se dá díky konstrukci $\tilde{\psi}_n$ geometricky odhadnout a v nejvyšší mocnině n je záporný a úměrný $n^{-\frac{9}{4}}$, což potvrzuje cluster jako vázaný stav.

V experimentu AEGIS v CERNu by se měla současně nacházet elektrická a magnetická pole válcové symetrie. Zatímco pohyb v těchto křížných polích je pro nabitou částici dán pomocí Lorentzovy síly, pro neutrální atom vodíku nebo antivodíku je situace složitější. Při drobných aproximacích touto pohybovou rovnicí může být

$$M\ddot{\vec{R}} = -\vec{\nabla}W_p, \quad (\text{Z.40}),$$

kde

$$W_p = -\frac{R}{n^2} + \left| \frac{3}{2}a_0en\vec{E} + \frac{e\hbar}{2m_e}\vec{B} \right| n_A + \left| -\frac{3}{2}a_0en\vec{E} + \frac{e\hbar}{2m_e}\vec{B} \right| n_B \quad (\text{Z.41})$$

je zároveň potenciální energie atomu v křížných polích a také spektrum daného atomu s vnějšími poli jako poruchami. Spektrum má původ v aparátu tzv. staré kvantové teorie [19] a je klasicky interpretovatelné jako dvojice nezávislých precesních pohybů dvou dipólů; (Z.41) je zobecněním (Z.1). Kvantová čísla n_A a n_B náleží (každé zvlášť nezávisle na druhém) množinám $\left\{ -\frac{n-1}{2}, \dots, \frac{n-1}{2} \right\}$, kde se postupuje po jedné – tedy přes celá čísla pro lichá n a přes poloviční zlomky pro n sudá. Tato čísla nemají žádnou přímou souvislost s kvantovými čísly p a m dobře definovanými jen pro případy, že je

jedno z polí nulové, nebo když jsou pole v daném místě rovnoběžná – v těchto případech jsou elektrické a magnetické poruchy souměřitelné, jak plyne [1] z komutátoru

$$\left[\frac{e\hbar}{2m_e} \vec{B} \vec{L}, -e\vec{E} \vec{R} \right] = i\hbar \frac{e^2}{2m_e} (\vec{E} \times \vec{B}) \vec{R}. \quad (\text{Z.42})$$

Současné působení elektrického a magnetického pole na atom je nelineární. V experimentu AEGIS slouží magnetické pole k záchytu antiprotonů a elektrické pole by mělo vznikající antivodíky urychlovat podél osy válcové symetrie. Vhodným modelovým elektrickým polem tohoto schopným může být

$$\Phi(r, z) = \left(\frac{z - z_\infty}{z_{\text{id.}} - z_\infty} \right) \cdot \left(\frac{\ln \frac{r}{r_{\text{in}}}}{\ln \frac{r_{\text{out}}}{r_{\text{in}}}} (\Phi_{\text{out}} - \Phi_{\text{in}}) + \Phi_{\text{in}} \right), \quad (\text{Z.43})$$

což je přesné partikulární řešení Poissonovy rovnice. Při vhodné kombinaci počátečních podmínek pohybu a kvantového stavu atomů skutečně toto pole urychluje atomy podél osy válcové symetrie za jejich současného oběhu válcové osy, výsledkem čehož je nepravidelná spirála, jak ukazují simulace pohybu podle (Z.40) a (Z.41). Kvalitativně podobné jsou trajektorie, přidá-li se k tomuto poli i magnetické pole experimentu AEGIS, jak plyne rovněž ze simulací. Nevyhnutelnost tohoto spirálovitého pohybu, kterou autor předpovídá, může mít na konstrukci experimentu AEGIS významný dopad.

Možné směry budoucího vývoje

Dosažené výsledky otevírají možnosti pro další bádání a aplikace.

Přesné řešení keplerovského pohybu v elektrostatickém poli válcové symetrie může významně pomoci při konstrukci takové pasti na atomy, molekuly nebo clustery – ukazuje cestu, jak pohyb omezit i v podélném směru, popř. naopak použít zařízení jako transportní linku; snadněji se pak mohou zohledňovat další jevy pro realističtější popis (srážky částic, teplotní rozdělení rychlostí, změny kvantových stavů a další); a vůbec úsporné vyjádření kritérií zachycení podle jen čtyř bezrozměrných veličin umožňuje optimalizovat parametry pasti (rozměry a potenciály) pro očekávané kvantové stavy nebo rychlosti částic, popř. naopak. Použitý model a postup mohou být uplatněny i na jiné než válcové symetrie.

Interpolační schéma navazující spojitě první derivace může najít uplatnění při simulacích jako nástroj významně omezující numerické chyby počítače a tím i nefyzikální výsledky v těch případech, kdy úloha na prvních derivacích diskrétně zadané veličiny závisí.

Navržený neobvyklý zápis rozkladu třídy funkcí s hexagonální symetrií (součiny tří kosinů, parametrická závislost na polovinách reciprokových vektorů, obtížné analogické vyjádření pomocí komplexních exponencií) může být užitečný vůbec pro studium těchto funkcí jako takových; otázka možnosti takového zápisu univerzálně, nejen pro dvojici funkcí, pro něž byl demonstrován, je otevřená. Rovněž pro matematiku může být zajímavý problém existence multiplicit a jejich nápadná souvislost s magickými čísly.

Na rozbor o možnostech měření difrakčního spektra dvojrozměrného clusteru v třírozměrném prostoru může přímo navázat experiment. Interpretace výsledků pak může být nejen dalším důkazem existence do clusterů kondenzované rydbergovské hmoty (a jejich řetězení do vláken), ale také například zdrojem informací o rozdělení elektronů v clusteru, pokud by na analýzu reciproké mříže navázal rozbor formfaktoru.

Přesné řešení modelu clusteru v LCAO přiblížení může s použitím důslednějších metod než zde naznačených linearizovaných prozradit mnoho o elektronickém spektru clusteru se všemi důsledky, obzvláště pokud jde o kovovou povahu objektu, formfaktor související s difrakčním spektrem nebo omezení kvantových jevů na hranici makrosvěta. Metoda použitá při odvození může být užitečná i při studiu větších objektů, než je cluster se sedmi atomy, a to daleko za rámec rydbergovské hmoty, protože na rozdíl od lineárních nebo cyklických řetězků atomů by tak byly vystiženy systémy, v nichž (alespoň některé) atomy mohou mít více než dva s nimi interagující sousedy.

Geometrická metoda náhrady určitých vlnových funkcí může při dostatečném zjemnění a rozboru také prokázat svou užitečnost i mimo studium rydbergovské hmoty.

Přesné partikulární řešení Poissonovy rovnice (a jiná jemu podobná) ve válcových souřadnicích, kterým se literatura věnuje méně než např. kartézským nebo sférickým, může mít další zajímavé vlastnosti za rámec urychlovací schopnosti v případě atomů. Může být rovněž elementárním prvkem atomové elektrostatické optiky.

Pohybová rovnice atomu vodíku nebo antivodíku v křížných polích vycházející ze staré kvantové teorie může být pojítkem mezi kvantovým a klasickým popisem mikrosvěta, tím spíš, pokud by platila přesně pro rydbergovské koherentní stavy.

Pro experiment AEGIS speciálně je významné zjištění, že současné nelineární působení křížných polí na atomy umožňuje jejich urychlování ve zvoleném směru i v místech silných gradientů magnetického pole a že podélný pohyb je pravděpodobně pro většinu atomů nutně spojen s pohybem rotačním vedoucím na trajektorii tvaru nepravidelné spirály.

Literatura

- [1] ŠPAČEK, Michal. *Dynamics of anti-hydrogen motion in the AEGIS experiment*. Praha, 2012. Diplomová práce. České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra fyziky. Vedoucí práce Doc. RNDr. Vojtěch Petráček, CSc.
- [2] MANYKIN, É. A., M. I. OZHOVAN a P. P. POLUÉKTOV. Impurity recombination of Rydberg matter. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 1994, **78**(1), 27-32.
- [3] MANYKIN, É. A. Multiphoton Processes in Systems of Rydberg Atoms. *Laser Physics*. 2012, **12**(2), 435-442.
- [4] WANG, Jiaxi a Leif HOLMLID. Planar clusters of Rydberg matter KN ($N=7, 14, 19, 37, 61$) detected by multiphoton fragmentation time-of-flight mass spectrometry. *Chemical Physics Letters*. 1998, **295**(5-6), 500-508. DOI: 10.1016/S0009-2614(98)00950-6. ISSN 00092614. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009261498009506>
- [5] BADIEI, S. a L. HOLMLID. *Magnetic field in the intrachuster medium: Rydberg matter with almost free electrons*. Monthly Notice of the Royal Astronomical Society. 2002, **335**(4), L94-L98.
- [6] POLUÉKTOV, Pavel P., É. A. MANYKIN a Michael I. OZHOVAN. Transition of an excited gas to a metallic state. *Sov. Phys. Tech. Phys. Lett.* 1980, **6**.
- [7] MANYKIN, Edward A., Michael I. OJOVAN, Pavel P. POLUEKTOV a Vitaly V. SAMARTSEV. Rydberg matter: properties and decay. In: *Proc. SPIE 6181, Photon Echo and Coherent Spectroscopy 2005*. Kaliningrad: SPIE, 2006, 2006-3-3, s. 618105-618105-9. DOI: 10.1117/12.675004. Dostupné také z: <http://proceedings.spiedigitallibrary.org/proceeding.aspx?articleid=1283205>

- [8] BADIOI, Shahriar a Leif HOLMLID. Rydberg Matter of K and N₂: angular dependence of the time-of-flight for neutral and ionized clusters formed in Coulomb explosions. *International Journal of Mass Spectrometry*. 2002, **220**(2), 127-136. DOI: 10.1016/S1387-3806(02)00689-9. ISSN 13873806. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1387380602006899>
- [9] BADIOI, Shahriar a Leif HOLMLID. Rydberg matter in space: low-density condensed dark matter. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2002, **333**(2), 360-364. DOI: 10.1046/j.1365-8711.2002.05399.x. ISSN 0035-8711. Dostupné také z: <https://academic.oup.com/mnras/article-lookup/doi/10.1046/j.1365-8711.2002.05399.x>
- [10] OLOFSON, Frans, Partik U. ANDERSSON a Leif HOLMLID. Rydberg Matter clusters of alkali metal atoms: the link between meteoritic matter, polar mesosphere summer echoes (PMSE), sporadic sodium layers, polar mesospheric clouds (PMCs, NLCs), and ion chemistry. In: *ArXiv.org* [online]. Ithaca (New York): Cornell University, 8 Feb 2010 [cit. 2019-01-22]. Dostupné z: <https://arxiv.org/abs/1002.1570>
- [11] NORMAN, G. É. Rydberg matter as a metastable state of strongly non-ideal plasma. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. 2001, **73**(1), 10-12. DOI: 10.1134/1.1355396. ISSN 0021-3640. Dostupné také z: <http://link.springer.com/10.1134/1.1355396>
- [12] WINTERBERG, F. Ultradense Deuterium. *Journal of Fusion Energy*. 2010, **29**(4), 317-321. DOI: 10.1007/s10894-010-9280-4. ISSN 0164-0313. Dostupné také z: <http://link.springer.com/10.1007/s10894-010-9280-4>
- [13] WINTERBERG, F. Ultra-dense deuterium and cold fusion claims. *Physics Letters A*. 2010, **374**(27), 2766-2771. DOI: 10.1016/j.physleta.2010.04.055. ISSN 03759601. Dostupné také z: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0375960110004949>
- [14] HOLMLID, L. Stimulated emission spectroscopy of Rydberg matter: observation of Rydberg orbits in the core ions. *Applied Physics B*. 2007, **87**(2), 273-281. DOI: 10.1007/s00340-007-2579-9. ISSN 0946-2171. Dostupné také z: <http://link.springer.com/10.1007/s00340-007-2579-9>
- [15] HOLMLID, Leif. Conditions for forming Rydberg matter: condensation of Rydberg states in the gas phase versus at surfaces. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2002, **14**(49), 13469-13479.

- [16] HOLMLID, Leif. Classical energy calculations with electron correlation of condensed excited states — Rydberg Matter. *Chemical Physics*. 1998, **237**(1-2), 11-19. DOI: 10.1016/S0301-0104(98)00259-6. ISSN 03010104. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0301010498002596>
- [17] TANABASHI, M. et al. *Review of Particle Physics*. Physical Review D [online]. 2018, 256 [cit. 2019-02-26]. Dostupné z: <https://journals.aps.org/prd/abstract/10.1103/PhysRevD.98.030001>
- [18] ŠPAČEK, Michal a Vojtěch PETRÁČEK. *Internal and external dynamics of anti-hydrogen in electric and magnetic fields of arbitrary orientation*. ArXiv.org [online]. 2012, 11 [cit. 2019-02-26]. Dostupné z: <https://arxiv.org/abs/1206.5171>
- [19] BORN, Max. *Vorlesungen über Atommechanik*. Berlin: Springer, 1925. ISBN 978-3-642-61898-7.
- [20] LANDAU, Lev Davidovich a Evgeny Mikhailovich LIFSHITZ. *Quantum Mechanics: Non-relativistic theory*. Third edition, revised and enlarged. Oxford: Pergamon Press, 1977. ISBN 0-08-033932-8.
- [21] ŠTOLL, Ivan. *Mechanika*. 2. Praha: Vydavatelství ČVUT, 2003. ISBN 80-01-02692-2.
- [22] KITTEL, Charles. *Úvod do fyziky pevných látek*. Praha: Academia, 1985.
- [23] 3D Surface Plotter. *Academo* [online]. [cit. 2019-02-26]. Dostupné z: <https://academo.org/demos/3d-surface-plotter/>
- [24] GRIFFITHS, David J. *Introduction to quantum mechanics*. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1995. ISBN 0-13-124405-1.
- [25] HADLEY, Peter. Molecular orbitals of benzene. *TU Graz* [online]. [cit. 2019-02-26]. Dostupné z: http://lampx.tugraz.at/~hadley/ss1/molecules/hueckel/mo_benzene.php
- [26] VILLATA, M. CPT symmetry and antimatter gravity in general relativity. *ArXiv.org* [online]. 2011, 6 [cit. 2019-12-10]. Dostupné z: <https://arxiv.org/abs/1103.4937>
- [27] AEGIS collaboration. *Proposal for the AEGIS Experiment at CERN Antiproton Decelerator : Antimatter Experiment: Gravity, Interferometry, Spectroscopy*. [s.l.] : [s.n.], 2007. 125 s. Dostupný z WWW:

<http://doc.cern.ch//archive/electronic/cern/preprints/spsc/public/spsc-2007-017.pdf>.

- [28] SEDLÁK, Bedřich; ŠTOLL, Ivan. *Elektrina a magnetismus*. Vydání 2., opravené a rozšířené. Praha : Academia, 2002. 636 s. ISBN 80-200-1004-1.
- [29] AGHION, S., O. AHLÉN a C. AMSLER, et al. A moiré deflectometer for antimatter. *Nature Communications*. 2014, 5(1), 4538. DOI: 10.1038/ncomms5538. ISSN 2041-1723. Dostupné také z: <http://www.nature.com/articles/ncomms5538>
- [30] STOREY, J., S. AGHION a O. AHLÉN, et al. Measuring the gravitational free-fall of antihydrogen. *Hyperfine Interactions*. 2014, **228**(1-3), 151-157. DOI: 10.1007/s10751-014-1055-2. ISSN 0304-3843. Dostupné také z: <http://link.springer.com/10.1007/s10751-014-1055-2>
- [31] HRUBEŠOVÁ, Hana. *Studium neutrální antihmoty v experimentu AEGIS* [online]. Praha, 2017 [cit. 2019-12-10]. Dostupné z: https://physics.fjfi.cvut.cz/publications/ejcf/bp_ejcf_17_hrubesova.pdf. Bakalářská práce. FJFI ČVUT v Praze. Vedoucí práce Doc. RNDr. Vojtěch Petráček, CSc.
- [32] ZEMANOVÁ, Alena. *Studium zachycení Rydbergovských atomů a manipulace s nimi pomocí magnetických polí* [online]. Praha, 2018 [cit. 2019-12-10]. Dostupné z: https://physics.fjfi.cvut.cz/publications/ejcf/VU_Alana.Zemanova.pdf. Výzkumný úkol. FJFI ČVUT v Praze. Vedoucí práce Doc. RNDr. Vojtěch Petráček, CSc.
- [33] ŠPAČEK, Michal a Vojtěch PETRÁČEK. Keplerian motion of particles with permanent electric dipole within cylindrical coaxial electrodes. *arXiv.org* [online]. 2019, 9 [cit. 2019-02-28]. Dostupné z: <https://arxiv.org/abs/1902.09659>

Příloha A

Kód pro výpočet multiplicity v počítači

```
#include <iostream>
#include <math.h>

using namespace std;

int main()
{
    double nmax=100;
    cout << "nmax = " << nmax << endl;
    double k=0;
    double l=0;
    int lint=0;
    int i=0;
    int imax=0;
    double nrec=1;
    double n42=0;
    double mtest=18;
    cout << "---" << endl;

    for (double n=1; n<= nmax; n++)
    {
        i=0;
```

```

cout << "n = " << n << endl;
double sn=floor(sqrt(4*n));
for(double m=0; m<=sn; m++)
{
    if (floor(sqrt((4*n - m*m)/3)) == sqrt((4*n - m*m)/3))
    {
        l=sqrt((4.0*n - m*m)/3.0);
        lint=l;
        k=(1.0/2.0)*(- l + m);
        if ((k > 0) && (k = floor(k)))
            //overeni, jestli nevyjde polovicni zlomek
            {
                cout << "vyhovuje k = " << k
                    << " & l = " << - lint << endl;
                i++;
            }
    }
}
cout << "M(" << n << ") = " << 6*i << endl;
cout << "---" << endl;
if (i > imax)
{
    imax = i;
    nrec=n;
    if (6*imax == mtest) {n42=n;}
}
}
cout << "Nejvyssi multiplicita pro n = 1 az n = " << nmax
<< " je m = " << 6*imax << "." << endl;
cout << "Prvni vyskyt nejvyssi multiplicity m = " << 6*imax
<< " je pro n = " << nrec << "." << endl;
cout << "Posledni vyskyt zvolene multiplicity m = " << mtest
<< " je pro n = " << n42 << "." << endl;
return 0;
}

```

