Calogerovské řešitelné modely

Autor rešeršní práce: Vít Jakubský
Vedoucí rešeršní práce: RNDr.Miloslav Znojil DrSc.

Obsah

Úvod

V následujím článku uvedeme základní myšlenky řešení pohybu tří částic se vzájemnou centrifugální interakcí na přímce. Toto řešení publikoval F.Calogero ve své práci z roku 1969. Dále uvedeme pojem exaktně řešitelný operátor a ukážeme, že lze takto nazvat i Calogerův hamiltonián. Jako příklad uvedeme i další hamiltoniány.

Na závěr se pokusíme najít praktický dopad exaktní řešitelnosti operátorů na problém nalezení vlastních funkcí daného operátoru.

1. Řešení tříčásticového problému v jedné dimenzi (analytické řešení)

V následující části předvedeme základní myšlenky a výsledky Calogerovy práce, řešící danou úlohu analyticky. Pro jednoduchost a demonstraci postupů, které použijeme později, začneme s dvoučásticovým případem. Schrödingerova rovnice této úlohy je

$$[-\sum_{i=1}^{2}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\frac{1}{8}\omega^2(x_1-x_2)^2+g(x_1-x_2)^{-2}]\Psi=E\Psi, \tag{1.1}$$

kde x_i jsou souřadnoce částic, $g > -\frac{1}{2}$ (viz Dodatek I).

Přejdeme do těžišťové soustavy transformací

$$R=1/2(x_1+x_2)$$

$$x=2^{-1/2}(x_1-x_2). \tag{1.2}$$

Vyloučením celkového pohybu těžiště dostaneme

$$[-\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{4}\omega^2x^2-\frac{1}{2}gx^{-2}-E]\Psi=0, \tag{1.3}$$

kde E nyní označuje energii relativního pohybu částic. Řešení jsou

$$\Psi_n(x)=x^{a+\frac{1}{2}}exp(-\frac{1}{4}\omega x^2)L_n^a(\frac{1}{2}\omega x^2), n=0,1,2,... \tag{1.4}$$

kde $a=\frac{1}{2}(1+2g)^{\frac{1}{2}}$ (1 a L_n^a Laguerrův polynom. Vlastní hodnoty $E_n$funkce Ψ_n jsou

$$E_n=\omega(2n+a+1),\quad n=0,1,2,.... \tag{1.5}$$

Díky silné singularitě v počátku máme řešení vždy pouze na intervalu $(-\infty,0)$ nebo $(0,\infty)$. Rozšíření na celou reálnou ose můžeme provést postulátem

$$\Psi(-x)=\pm\Psi(x),\quad x\geq 0 \tag{1.6}$$

ve kterém kladné znaménko odpovídá Boseho a záporné Fermiho statistice. Je zřejmé, že v Boseho nebo Fermiho statistice jsou energetické hladiny nedegenerované, zatímco pro Boltzmanovu statistiku (v (1.6) bereme libovolné znaménko) každé hodnotě energie odpovídají právě dva stavy.

Je také vidět, že (1.4) přechází pro $g\to 0$ v rovnici harmonického oscilátoru s vlastníni funkcemi

$$\Psi_n(x)=exp(-\frac{1}{4}\omega x^2)H_{2n+1}((\frac{1}{2}\omega)^{1/2}x),\ n=0,1,2,... \tag{1.7}$$

a energií $E_n=\omega(2n+\frac{3}{2})$. Z toho je vidět, že zapnutí centrifugálního potenciálu posouvá spektrum o konstantní hodnotu $\omega(a-\frac{1}{2})$.

(1 Podrobněji viz Dodatek I

Nyní přejdeme k systému tří částic. Jeho Schrödingerova rovnice je

$$[-\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2}+\frac{1}{8}\omega^2((x_1-x_2)^2+(x_2-x_3)^2+(x_3-x_1)^2)$$

$$+g_3(x_1-x_2)^{-2}+g_2(x_3-x_1)^{-2}+g_1(x_2-x_3)^{-2}]\psi=E\psi. \tag{1.8}$$

Stejně jako v předchozím vyloučíme celkový pohyb soustavy zavedením Jacobiho souřadnic:

$$R=\frac{1}{3}(x_1+x_2+x_3),$$

$$x=2^{-1/2}(x_1-x_2),\quad y=6^{-1/2}(x_1+x_2-2x_3). \tag{1.9}$$

Po vyloučení celkového pohybu dostáváme rovnici

$$[-\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{3}{8}\omega^2(x_1^2+x_2^2)+\frac{1}{2}g_3x^{-2}$$

$$+\frac{1}{2}g_1[3^{-1/2}y-x]^{-2}+\frac{1}{2}g_2[3^{-1/2}y+x]^{-2}-E]\psi=0, \tag{1.10}$$

kde E je opět energie relativního pohybu.

Dále x a y nahradíme sférickými souřadnicemi dle předpisu

$$x=r\sin\phi,\quad y=r\cos\phi$$

$$r\in[0,\infty),\quad \phi\in[0,2\pi), \tag{1.11}$$

Stojí za povšimnutí, že hodnota ϕ odpovídá určitému pořadí částic a to následujícím způsobem

$$\begin{aligned}
&0<\phi<\frac{1}{3}\pi \quad x_1>x_2>x_3, && \pi<\phi<\frac{4}{3}\pi \quad x_3>x_2>x_1\\
&\frac{1}{3}<\phi<\frac{2}{3}\pi \quad x_1>x_3>x_2, && \frac{4}{3}<\phi<\frac{5}{3}\pi \quad x_2>x_3>x_1\\
&\frac{2}{3}<\phi<\pi \quad x_3>x_1>x_2, && \frac{5}{3}<\phi<2\pi \quad x_1>x_2>x_3.
\end{aligned} \tag{1.12}$$

Snadno se také odvodí

$$x_1-x_2=2^{1/2}r\sin\phi,\quad x_2-x_3=2^{1/2}r\sin(\phi+\frac{2}{3}\pi)$$

$$x_3-x_1=2^{1/2}r\sin(\phi+\frac{4}{3}\pi). \tag{1.13}$$

V těchto nových proměnných má Schrödingerova rovnice tvar

$$(-\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{3}{8}\omega^2r^2+\frac{M}{r^2}-E)\psi=0, \tag{1.14}$$

kde

$$M=-\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{1}{2}(\frac{g_3}{\sin^2\phi}+\frac{g_1}{\sin^2(\phi+\frac{2}{3}\pi)}+\frac{g_2}{\sin^2(\phi+\frac{4}{3}\pi)}). \tag{1.15}$$

Tvar rovnice (1.14)naznačuje řešení separací promněných, proto zvolíme ansatz

$$\psi=R(r)f(\phi). \tag{1.16}$$

Dále označíme b_l^2 vlastní hodnotu operátoru M

$$Mf(\phi)=b_l^2f(\phi). \tag{1.17}$$

Tím dostáváme rovnici

$$(-\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{3}{8}\omega^2r^2+\frac{b_l^2}{r^2}-E)R=0 \tag{1.18}$$

pro radiální část vlnové rovnice.

Její řešení jsou

$$R_{n,l} = r^{b_l} exp[-\frac{1}{4}(\frac{3}{2})^{1/2}\omega r^2] L_n^{b_l}[\frac{1}{2}(\frac{3}{2})^{1/2}\omega r^2],$$

$$n = 0, 1, 2..., \quad l = 0, 1, 2, ..., \tag{1.19}$$

kde $L_n^{b_l}$ jsou opět Laguerrovy polynomy. Odpovídající hodnoty energie jsou

$$E_{n,l} = (\frac{3}{2})^{1/2}\omega(2n + b_l + 1), \quad n = 0, 1, 2, ..., \quad l = 0, 1, 2, ... \tag{1.20}$$

Zbývá vyřešit rovnici (1.17). Zde budeme uvažovat pro jednoduchost pouze dva případy a to $g_1 = g_2 = 0, \; g = g_3$ a $g_1 = g_2 = g_3 = g$.

Začneme prvním z nich. Rovnice (1.17) získá tvar

$$Mf(\phi) = (-\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{2}(\frac{g_3}{\sin^2\phi})) = b_l^2 f(\phi), \tag{1.21}$$

Ten se dá vhodnou substitucí převést na hypergeometrickou rovnici, z které dostáváme

$$f_l(\phi) = (\sin\phi)^{a+\frac{1}{2}} F(\frac{1}{2}(a + \frac{1}{2} - b_l), \frac{1}{2}(a + \frac{1}{2} + b_l), 1 + a; sin^2\phi) \tag{1.21a}$$

$$= \cos\phi(\sin\phi)^{a+\frac{1}{2}} F(\frac{1}{2}(a + \frac{3}{2} - b_l), \frac{1}{2}(a + \frac{3}{2} + b_l), 1 + a; sin^2\phi), \tag{1.21b}$$

kde a je definováno stejně jako v dvoučásticovém případě. Řešení jsou fyzikálně akceptovatelná pouze tehdy, redukuje-li se hypergeometrická funkce na polynom. Vlastní hodnoty obdržíme z požadavku rovnosti prvního argumentu hypergeom. funkce nekladnému celému číslu. Tím nakonec dostaneme

$$f_l(\phi) = (\sin\phi)^{a+\frac{1}{2}} C_l^{a+\frac{1}{2}}(cos\phi), \quad l = 0, 1, 2, .. \tag{1.22}$$

$$b_l = l + a + \frac{1}{2}, \tag{1.23}$$

kde $C_l^{a+\frac{1}{2}}$ je Gegenbauerův polynom.

Tato řešení mají opět díky singularitě v 0 a π definiční obory právě $< 0, \pi >$ nebo $< \pi, 2\pi >$. Prodloužit na celý interval $< 0, 2\pi >$ je můžeme postulátem

$$f_l(2\pi - \phi) = \pm f_l(\phi), 0 \leq \phi \leq \pi, \tag{1.24}$$

který je opět inspirován Boseho nebo Fermiho statistikou. S tím se také shoduje fakt, že při pěrchodu z intervalu $< 0, \pi >$ do $< \pi, 2\pi >$ se mění pořadí částic 1 a 2 (viz vztahy (1.12)).

Dosazením dosavadních výsledků do ansatzu dostaneme vlastní funkci ve tvaru

$$\psi_{n,l}(r, \phi) = r^{l+a+\frac{1}{2}} exp[-\frac{1}{4}(\frac{3}{2})^{1/2}\omega r^2] L_n^{b_l}[\frac{1}{2}(\frac{3}{2})^{1/2}\omega r^2](\sin\phi)^{a+\frac{1}{2}} C_l^{a+\frac{1}{2}}\cos(\phi), \tag{1.25a}$$

$$\psi_{n,l}(r, 2\pi - \phi) = \pm\psi_{n,l}(r, \phi), \quad 0 < \phi < \pi \tag{1.25b}$$

Pro daná kvantová čísla n a l jsou vlastní hodnoty energie $E_{n,l}$ v rámci Boseho nebo Fermiho statistiky nedegenerované, v Boltzmanově statistice je degenerace dvojnásobná. Pokud označíme $N = 2n + l$, pak je degenerace energetické hladiny v Boseho, resp. Fermiho statistice rovna $[(N + 2)/2]$, v Boltzmanově je dvakrát větší.

Nyní přikročíme k řešení druhého speciálního případu (tzn. $g_1 = g_2 = g_3 = g$) Rozdíl od předchozí úlohy je pouze v operátoru M. Ten nyní je

$$MF_l(\phi) = [-\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{g}{2}(\frac{1}{\sin^2\phi} + \frac{1}{\sin^2(\phi + \frac{2}{3}\pi)} + \frac{1}{\sin^2(\phi + \frac{4}{3}\pi)})]F_l(\phi) = B_l^2 F_l(\phi). \tag{1.26}$$

Pro jeho zjednodušení použijeme identitu

$$sin^{-2}(\phi) + sin^{-2}(\phi + \frac{2}{3}\pi) + sin^{-2}(\phi + \frac{4}{3}\pi) = 9sin^{-2}(3\phi), \tag{1.27}$$

kterou pracně odvodil F. Calogero, a která převede rovnici (1.26) spolu se substitucí $3\phi = \tilde{\phi}$ na tvar

$$Mf(\tilde{\phi}) = -(\frac{\partial^2}{\partial\tilde{\phi}^2} + \frac{1}{2}(\frac{g}{\sin^2\tilde{\phi}})) = b_l^2 f(\tilde{\phi}) \tag{1.28}$$

Řešení vidíme okamžitě na základě výsledků předchozí úlohy.

$$F_l(\phi) = f_l(3\phi), \quad B_l = 3b_l \tag{1.29}$$

Současně si také musíme uvědomit, že tyto řešení mají za definiční obor interval $(k\frac{\pi}{3}, (k+1)\frac{\pi}{3}),\ k = 0,1,2,3,4,5$. Můžeme je však v duchu předchozího pospojovat postulátem

$$F_l(\phi + p\frac{\pi}{3}) = \pm F_l(\phi), \quad 0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{3}, \quad p = 0,1,2,3,4,5 \tag{1.30}$$

Takže finální řešení tohoto problému je

$$\psi_{n,l}(r,\phi) = r^{3l+3a+\frac{3}{2}} exp[-\frac{1}{4}(\frac{3}{2})^{1/2}\omega r^2] L_n^{3l+3a+\frac{3}{2}}[\frac{1}{2}(\frac{3}{2})^{1/2}\omega r^2](\sin(3\phi))^{a+\frac{1}{2}}$$

$$\times C_l^{a+\frac{1}{2}}(\cos(3\phi)), \quad 0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{3} \tag{1.31}$$

$$\psi_{nl}(r, \phi + p\frac{\pi}{3}) = (\pm)^{pl}\psi_{nl}(r,\phi), \quad 0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{3}, \quad p = 1,..,5 \tag{1.32a}$$

$$\psi_{nl}(r, \phi + p\frac{\pi}{3}) = (\pm)^{p(l+1)}\psi_{nl}(r,\phi), \quad 0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{3}, \quad p = 1,..,5 \tag{1.32b}$$

$$E_{2n+3l} = (\frac{3}{4})^{\frac{1}{2}}\omega(2n + 3l + 3a + \frac{5}{2}). \tag{1.33}$$

Opět značíme L_m^b a C_n^b Laguerrovy a Gegenbauerovy polynomy, kvantová čísla l a n jsou nezáporná celá.

Je dobré si povšimnout, že $\sin(3\phi)$ a $\cos(3\phi)$ závisí na x_i symetrickým způsobem:

$$\sin 3\phi = -3(6)^{1/2}(x_1 - x_2)(x_2 - x_3)(x_3 - x_1)$$

$$\times[(x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + (x_3 - x_2)^2]^{\frac{-3}{2}},$$

$$\cos 3\phi = 2^{1/2}(x_1 + x_2 - 2x_3)(x_2 + x_3 - 2x_1)(x_3 + x_1 - 2x_2)$$

$$\times[(x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + (x_3 - x_2)^2]^{\frac{-3}{2}}. \tag{1.34}$$

Spektrum energie je opět ekvidistantní a shoduje se se spektrem energie hamiltonianu bez centrifugálního členu a s Fermiho statistikou, pakliže provedeme posunutí hodnot energie o $3(\frac{3}{2})^{1/2}\omega(a - \frac{1}{2})$.

2. **Algebraický přístup**

Protože budeme v budoucnu často používat pojmy kvazi-exaktně řešitelný a exaktně řešitelný lineární diferenciální operátor, uveďme alespoň zhruba, co pod těmito názvy rozumíme.

Prvním z nich označíme operátor, např. T, který zachovává určitý konečnědimenzionální prostor P_n, tzn. $T : P_n \to P_n$. Exaktně řešitelný je pak operátor K, který zachovává tzv. flag podprostorů. Podrobněji, když máme posloupnost podprostorů $P_0 \subset P_1 \subset P_2 \subset ... \subset P_n$, působí na nich operátor K tímto způsobem:

$$K : P_i \to P_i$$

Flagem obecně rozumíme obecně nekonečnou posloupnost dosebe vnořených podprostorů . Nejjednodušším příkladem je např. posloupnost polynomiálních podprostorů V_n, kde $V_n = (1, x, x^2, ..., x^n)$.

Nyní uvedeme příklad vycházející z teorie invariantních podprostorů lineárních diferenciálních operátorů v jedné dimenzi [2], který nám poslouží k lepší orientaci v terminologii a postupech, které později uplatníme.

Mějme tedy linearní dif. operátor T_k k-tého řádu v jedné proměnné a prostor polynomů stupně n

$$P_n = (1, x, x^2, ..., x^n). \tag{2.1}$$

Operátor T_k nazveme kvazi-exaktně řešitelný (q.e.ř), jestliě zachovává prostor P_n a exaktně řešitelný (e.ř), jestliže zachovává flag podprostorů $P_0 \subset P_1 \subset P_2 \subset ... \subset P_n$.

Ukazuje se, že libovolný q.e.ř. operátor lze napsat jako polynom k- tého stupně v operátorech

$$\begin{aligned} J^+ &= x^2\partial_x - nx, \\ J^0 &= x\partial_x - \frac{n}{2}, \\ J^- &= \partial_x, \end{aligned} \qquad (2.2),$$

v případě, že $n > k - 1$. Pro $n \le k - 1$ lze zapsat jako polynom n- tého stupně v operátorech (2.2) pouze ta část T, jejíž řád není vyšší než n. Operátory (2.2) se vyznačují tím že jsou reprezentací Lieovy algebry $sl_2(R)$. Platí také tvrzení, že libovolný polynom v (2.2) je q.e.ř. operátor. Pokud je tedy T_k zapsatelný jako polynom k-tého stupně v operátorech (2.2), je q.e.ř. a zachovává prostor P_n. Pro případ $n = 2$ je obecný tvar q.e.ř. operátoru druhého stupně tento:

$$T_2 = c_{++}J^+J^+ + c_{+0}J^+J^0 + c_{+-}J^+J^- + c_{0-}J^0J^- + c_{--}J^-J^- + c_+J^+ + c_0J^0 + c_-J^- + c. \tag{2.3}$$

Nyní zkusme najít operátory, které by zachovávaly prostor

$$\beta_n = (\alpha(z), \alpha(z)\beta(z), \alpha(z)\beta(z)^2, ...\alpha(z)\beta(z)^n), \tag{2.4}$$

kde $z \in R$, α a β jsou nějaké funkce.

Předně provedeme substituci $x = \beta(z)$, a tzv. kalibrační rotaci operátoru T_k:

$$\tilde{T}_k := \alpha(z)T_k\alpha(z)^{-1}$$

$$T_k : P_n \to P_n,\ \tilde{T}_k : \beta_n \to \beta_n. \tag{2.5}$$

Pokud tedy T_k zachovává P_n, dává nám (2.5) a $x = \beta(z)$ předpis, jak vytvořit operátor $\tilde{T}_k$ zachovávající prostor β_n (tudíž je $\tilde{T}_k$ q.e.ř.)

Ještě jednou poznamenejme, že tento příklad je vzhledem k následujícímu pouze ilustrativní, protože ve vyšších dimenzích jsou třeba definice i tvrzení modifikovat. Ukažme kupříkladu konstrukci invariantních podprostorů v dourozměrném případě. Definujme například prostory

$$P_n^I = (1, x, y, x^2, xy, y^2, ...x^n, x^{n-1}y, ...xy^{n-1}, y^n), \tag{2.6}$$

$$P_{r,n}^{II} = \sum_{i,j}^{0 \le i+rj \le n} \alpha_{ij}x^iy^j, \tag{2.7}$$

Pokud každému bodu v R^2 se souřadnicemi $[d_1, d_2]$, $d_1, d_2 \in N$ přiřadíme polynom $x^{d_1} y^{d_2}$, lze prostory (2.6) a (2.7) znázornit takto:

Různým typům invariantních podprostorů samozřejmě odpovídají různé operátory J_i, které jsou reprezentací určité Lieovy algebry a jejichž polynomy jsou q.e.ř. operátory zachovávající dané prostory. Například prostoru (2.6) odpovídají

$$J_3^1 = y^2\partial_y + xy\partial_x - ny, \; j_2^1 = x^2\partial_x + xy\partial_y - ny$$

$$J_3^2 = -y\partial_x, \; J_1^2 = -\partial_x, \; J_1^3 = -\partial_y, \; J_2^3 = -x\partial_y$$

$$J_d = y\partial_y + 2x\partial_x - n, \; \tilde{J}_d = 2y\partial_y + x\partial_x - n, \tag{2.8}$$

a naproti tomu prostoru (2.7) odpovídají generátory (viz [2])

$$J_1 = \partial_x, \; J_2 = x\partial_x - \frac{n}{3r}, \; J_3 = y\partial_y - \frac{n}{3r}, \; J_4 = x^2\partial_x + rxy\partial_y - nx$$

$$J^{5+i} = x^i\partial_y, \; i = 0, 1, ...r. \tag{2.9}$$

V dalším textu tedy budeme usilovat o převedení daných hamiltoniánů na tvar, který by se dal zapsat jako polynom v generátorech nějaké Lieho algebry (např. pro R^2 v generátorech (2.8) nebo (2.9)). Po dosažení tohoto bude zbývat zjistit, jestli operátor není dokonce exaktně řešitelný (tzn. zachovává flag podprostorů invariantních vzhledem k působení použitých generátorů).

Calogerův model

Tento model představuje systém N částic na přímce s jedno a dvoučásticovou interakcí. Hamiltonián je tvaru

$$H_{cal} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}[-\partial_i^2 + \omega^2 x_i^2] + \sum_{j<i}^{N}\frac{g}{(x_i - x_j)^2}, \tag{2.10}$$

kde ω budeme brát $\omega = 1$ a $g = \nu(\nu - 1)$.

Jeho vlastní funkce jsou tvaru $\beta^{\nu^*} e^{-\frac{X^2}{2}} P(x)$, kde β je Vandermondův determinant, $X^2 = \sum_{i=1}^{N} x_i^2$, ν^* je bud ν nebo $(1-\nu)$ a $P(x)$ je polynom zcela symetrický vůči permutaci libovolných dvou souřadnic. Operátor (2.10) je také, po vyloučení pohybu těžiště, invariantní vůči posunutí $x_i \to x_i + a$.

Provedeme kalibrační rotaci operátoru (2.10) (viz(2.5)):

$$h_{cal} \equiv -2\beta^{-\nu^*} e^{\frac{X^2}{2}} H_{cal} \beta^{\nu^*} e^{-\frac{X^2}{2}} = \sum_{i=1}^{N}\partial_i^2 - 2\sum_{i=1}^{N} x_i\partial_i + \nu^* \sum_{j\neq i}^{N}\frac{1}{x_i - x_j}[\partial_i - \partial_j] - N - \nu^* N(N-1), \tag{2.11}$$

čímž získáme operátor působící pouze na polynomiální část vlastních funkcí. Jeho konstantní členy budeme později vynechávat.

Zavedeme translačně invariantní souřadnice

$$y_i = x_i - \frac{\sum_{j=1}^{N} x_i}{N}, \; i = 1, 2...N. \tag{2.12}$$