

Instytut Podstawowych Problemów Techniki
Polskiej Akademii Nauk

Praca doktorska

**Hamiltonowskie i kwantowe układy
z symetriami i więzami. Modele
nieliniowe i ich zastosowania
fizyczne**

Agnieszka Martens

Promotor

Prof. dr hab. Jan Jerzy Sławianowski

Zakład Teorii Ośrodków Ciągłych

Warszawa 2005

Serdecznie dziękuję profesorowi J. J. Sławianowskiemu za okazaną pomoc, cenne uwagi, miłą współpracę, wyrozumiałość i życzliwość w trakcie wykonywania niniejszej pracy.

Spis treści

Wstęp	3
Rozdział 1. Wstępne pojęcia dotyczące mechaniki ciał jednorodnie deformowalnych	9
1.1. Przestrzeń konfiguracyjna	9
1.2. Wielkości kinematyczne	12
1.3. Wielkości dynamiczne	14
1.4. Newtonowska i hamiltonowska przestrzeń stanów	15
1.5. Stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego	17
1.6. Zmienne ką-działanie	19
1.7. Warunki kwantowe Bohra-Sommerfelda	21
1.8. Przejście do teorii kwantowej	22
Rozdział 2. Metoda wielomianów Sommerfelda	25
2.1. Zwykła funkcja Riemanna P	26
2.2. Rozwiązywanie zagadnień własnych ze zwykłą funkcją Riemanna P	29
2.3. Rozwiązywanie zagadnień własnych z konfluentną funkcją Riemanna P	31
2.4. Zestawienie wzorów do rozwiązywania zagadnień własnych metodą Sommerfelda	34
Rozdział 3. Bąk sferyczny z dylatacjami	37
3.1. Ciało sztywne - parametryzacja problemu. Wielkości kinematyczne i dynamiczne	37
3.2. Formalizm kanoniczny	40
3.3. Bąk sferyczny. Zmienne hamiltonowskie	41
3.4. Stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego. Zmienne działania. Warunki Bohra-Sommerfelda	43
3.4.1. Zdegenerowany oscylator torsyjny	44

3.4.2. Problem Coulomba	46
3.4.3. Podsumowanie	46
3.5. Stacjonarne równanie Schrödingera	47
3.5.1. Zdegenerowany oscylator torsyjny	48
3.5.2. Problem Coulomba	50
3.5.3. Podsumowanie	51
3.6. Błąk sferyczny z dylatacjami	51
3.7. Stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego. Zmienne działania. Warunki Bohra-Sommerfelda	54
3.7.1. Oscylator harmoniczny	55
3.7.2. Potencjał Coulomba	56
3.7.3. Przypadki szczególne	57
3.7.4. Podsumowanie	59
3.8. Stacjonarne równanie Schrödingera	59
3.8.1. Oscylator harmoniczny	60
3.8.2. Potencjał Coulomba	61
3.8.3. Przypadki szczególne	62
3.8.4. Podsumowanie	63
Rozdział 4. Dwuwymiarowe ciało afinicznie sztywne	64
4.1. Parametryzacja problemu	64
4.2. Formalizm kanoniczny	66
4.3. Płaskie zagadnienie izotropowe	67
4.4. Stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego. Zmienne działania. Warunki Bohra-Sommerfelda	71
4.4.1. Model <i>kartezjańskiego</i> potencjału.	73
4.4.2. Model <i>biegunowego</i> potencjału.	74
4.4.3. Podsumowanie	76
4.5. Stacjonarne równanie Schrödingera	77
4.5.1. Model <i>kartezjańskiego</i> potencjału.	79
4.5.2. Model <i>biegunowego</i> potencjału	80
4.5.3. Podsumowanie	84
Wnioski	85
Bibliografia	87

Wstęp

Model ciała afinicznie sztywnego, tzn. deformowalnego jednorodnie, jest używany w mechanice kontinuum, a także w rozmaitych zagadnieniach dynamiki układów wielocząstkowych od dawna i w różnych kontekstach. Zacząć trzeba od tego, że jest to przypadek szczególny kolektywnych stopni swobody i metod momentowych w zagadnieniu wielu ciał, mechanice ośrodków ciągłych i teorii pola. Wiąże to się z klasycznymi procedurami dyskretyzacyjnymi typu Rietza, Galerkina [55] i z metodą elementów skończonych. Jest znanym faktem, że dosyć często zagadnienia o nieskończonej, w tym kontynualnej, liczbie stopni swobody da się w dobrym przybliżeniu efektywnie opisać w języku skończenie-wymiarowych układów dynamicznych. Przejście od układów opisywanych równaniami różniczkowymi cząstkowymi do modelu opartego na równaniach różniczkowych zwyczajnych jest zawsze wielkim uproszczeniem zarówno w sensie analizy jakościowej jak i rachunków przybliżonych oraz technik numerycznych.

Metody oparte na modach kolektywnych i procedurach momentowych są skuteczne, gdy zjawisko ma na tyle nielokalny charakter, że do jego zadowalającej charakterystyki wystarczy niewielka liczba parametrów zależnych jednakowo, na równych prawach od zmiennych jednocząstkowych. Te nielocalne, „kolektywne” parametry winny przy tym w przybliżeniu odpręgać się od pozostałych i spełniać z dobrym przybliżeniem autonomiczny układ równań różniczkowych zwyczajnych (jako funkcje czasu). Ma to miejsce np. wtedy, gdy długość fal sprężystych wzbudzanych w ciele jest porównywalna z jego rozmiarami. Występowanie modów kolektywnych wiąże się z geometrią przestrzeni fizycznej i z geometriami innych przestrzeni występujących w opisie kinematyki problemu. Przestrzeń konfiguracyjna zmiennych kolektywnych jest z reguły jakąś grupą Liego związaną ze wspomnianymi strukturami geometrycznymi lub przestrzenią jedno-

rodną grupy Liego. Związek między strukturą teorii fizycznych na fundamentalnym poziomie a geometrią sprawia, że są to z reguły grupy automorfizmów rozmaitych struktur przestrzennych. Typowym przykładem jest bryła sztywne. Związane z nią pojęciowo układy dynamiczne na grupie ortogonalnej są prawozorem dla wszystkich innych uogólnień tego typu. Skrajnym przypadkiem grupowego układu dynamicznego wzorowanego na bryle sztywnej jest hydrodynamika idealnej cieczy nieściśliwej (Arnold [3]); istnieją też sformułowania podobnego typu dla teorii sprężystości. Nieskończenie-wymiarowy język oznacza, że nie jest to oczywiście dyskretyzacja, jest to jednak wprowadzenie wielocząstkowych efektywnych modów prostszych niż mikroskopowy opis układu jako dyskretnego agregatu wielu cząstek, będącego uśrednionym opisem ich zachowania, podległego prawidłowościom statystycznym. Metody heurystyczne oparte na analogii z grupami skończenie-wymiarowymi pozwalają ponadto odgadnąć, zapostulować niektóre typy rozwiązań i następnie sprawdzić je wprost bezpośrednim rachunkiem. Oczywiście brak efektywnej, dobrze sformułowanej teorii nieskończenie-wymiarowych „grup Liego”. Tym cenniejsze są opisy pośrednie między bryłą sztywną, a pełnym opisem ośrodka ciągłego. Najprostszym modelem jest ciało afinicznie sztywne, tzn. sztywne w sensie geometrii afinicznej. Zachowane są wtedy wszystkie relacje afiniczne między punktami materialnymi, a więc zbiór prostych materialnych, ich równoległość oraz proporcje odcinków na prostych równoległych. Przestrzeń konfiguracyjna modów kolektywnych daje się wtedy utożsamić z grupą afiniczną, a raczej z jej przestrzenią jednorodną z trywialnymi grupami izotropii.

Tego rodzaju „usztynione” deformacje mają miejsce, jak wspomniano, w makroskopowych ciałach sprężystych, gdy wzbudzone fale mają długość porównywalną z rozmiarami liniowymi ciała. Również niektóre zagadnienia astrofizyczne (teoria kształtu Ziemi, wibracje i obroty gwiazd) wiążą się z zastosowaniem tego rodzaju metod [5], [6], [10]. Dynamika obiektów w fizycznej mikroskali jak jądra atomowe i molekuly również wykorzystuje tego rodzaju opis kolektywny (skrajny przykład – molekula fosforu P_4 ma wyłącznie afiniczne stopnie swobody). Dynamika molekul i różnych struktur nadmolekularnych wiąże się z teorią ośrodków ze strukturą, jak np. kryształy molekularne, a w ciągłej granicy – kontinua ze strukturą, np. mikromorficzne (uogólnienie mikropolarnych) lub mikromorficzne wyższego rzędu. Właśnie tutaj miało miejsce jedno z pierwszych zastosowań afinicznych stopni swobody jako modelu modów wewnętrznych, tzn. teoria mikromorficzna Eringena. Później model afiniczny stał się przedmiotem samym w sobie, chociaż trzeba przyznać, że potrzeby teorii ośrodków strukturalnych dostarczają silnej motywacji dla badań układów dynamicznych opisujących

zachowanie pojedynczych ciał afinicznie sztywnych. Zagadnienia te są interesujące nie tylko w trzech ale i dwóch (także w jednym) wymiarach, jako np. modele powłok z mikrostrukturą. Z punktu widzenia czystej mechaniki analitycznej, modele te wiążą się silnie z teorią układów całkowalnych oraz zagadnieniami symetrii i degeneracji.

Zastosowania mikroskopowe, w tym na poziomie molekularnym i nadmolekularnym wymagają użycia modelu kwantowego. Najprostszy podejściem jest tu Schrödingerska kwantyzacja w języku funkcji falowych na odpowiedniej grupie Liego lub jej przestrzeni jednorodnej. Zagadnienie to wiąże się też z przybliżeniem quasiklasycznym, a to ze względu na zastosowania w mechanice dużych molekuł, fullerenów, itp., gdzie jednocześnie występują w ramach opisu tego samego obiektu zjawiska klasyczne i kwantowe.

Model ciała afinicznie sztywnego wiąże się też z metodą elementów skończonych i z technikami numerycznymi. W metodzie tej, w każdym razie w jednej z bardzo popularnych wersji, ciało poddane zostaje triangulacji na niewielkie elementy, np. czworościany (sympleksy) deformujące się w przybliżeniu w sposób jednorodny. W ten sposób kontinuum zostaje opisane jako skończony agregat wzajemnie oddziałujących ciał afinicznie sztywnych. Umożliwia to zastosowanie budzących zaufanie, wiarygodnych metod łączących w sobie środki analityczne i numeryczne (Rubin [37]).

Model ciała afinicznie sztywnego pojawił się, jak wspomniano, w teorii ośrodków mikromorficznych pochodzącej od Eringena i jego szkoły [15], [16]. Jako teoria oparta na geometrii różniczkowej i mechanice Hamiltonowskiej oraz kwantowej był rozwinięty w różnych aspektach przez profesora J. J. Sławianowskiego i współpracowników [52], [44], [48], [50], [56], [60]-[68]. Niektórzy autorzy używają też nazwy ciało pseudo-sztywne [11], [12], [13], [34], [70], [71].

W tej rozprawie koncentrujemy się głównie na analizie istotnie nieliniowych modeli Hamiltonowskich dotyczących układów deformowalnych z więzami. Ze względu na planowane zastosowania do opisu obiektów w skali mikroskopowej badana jest równolegle kwantowa wersja problemu.

Przesłankami, które nas skłoniły do tych badań jest coraz większe zapotrzebowanie na modele modów wewnętrznych i kolektywnych (np. ośrodki z mikrostrukturą, kryształy molekularne, nanostruktury), w których ma miejsce pewnego rodzaju przenikanie się poziomu klasycznego i kwantowego. Klasyczne i kwantowe problemy dynamiki obiektów deformacyjnych były raczej rozpatrywane osobno, bądź w oparciu o tradycyjne metody teorii sprężystości na poziomie makro-, bądź w sposób czysto kwantowy na poziomie mikroskopowym. Już zjawiska nadprzewodnictwa i nadciekłości wykazały

konieczność jednoczesnego używania pojęć klasycznych i kwantowych. Obecna eksplozja badań nad ośrodkami z mikrostrukturą, zjawisk w nanoskali, postępy w inżynierii materiałowej i potrzeby rodzącej się informatyki kwantowej, wymagają syntezy badań prowadzonych dotychczas we względnej separacji. We wspomnianych nietypowych zastosowaniach jednocześnie teorii sprężystości i mechaniki kwantowej układów wielocząstkowych dużą rolę z pewnych względów mogą odgrywać badane przez nas modele dynamiczne niezmiennicze względem grupy liniowej lub grupy Weyla. Z czysto matematycznego punktu widzenia metodyka naszych badań oparta jest na geometrycznej teorii układów Hamiltonowskich, teorii układów całkownych (wliczając w to problemy degeneracji), kwantowej i quasiklasycznej mechanice takich układów oraz teorii funkcji specjalnych.

Zagadnienie ciała deformowalnego jednorodnie w trzech wymiarach nastęrcza szeregu problemów matematycznych, które nie pozwalają na efektywne, analityczne podanie rozwiązań w funkcjach elementarnych, czy choćby w znanych funkcjach specjalnych. W zasadzie musimy więc polegać na metodach jakościowych. Potencjały, dla których możliwa jest separacja równań ruchu są potencjałami o „niefizycznym” kształcie, które nie spełniają znanych wymagań teorii sprężystości. Co więcej, nie nadają się też do zastosowań mikrofizycznych, np. jako fenomenologiczne modele energii drgań sprężystych w cząsteczkach. Jest natomiast regułą, że potencjały izotropowe o „fizycznym” kształcie prowadzą do równań nieseparowalnych. Dlatego też zbadane zostały te przypadki, dla których można otrzymać analityczne rozwiązania. Są to dwa podstawowe modele: zagadnienie bąka sferycznego z dylatacjami w izotropowym polu sił oraz dwuwymiarowe ciało afinicznie sztywne przy założeniu podwójnej izotropii - przestrzennej i materialnej. Przestrzeniami konfiguracyjnymi tych zagadnień są odpowiednio: grupa Weyla $SO(3, \mathbb{R}) \times \mathbb{R}^+$ oraz grupa liniowa $GL(2, \mathbb{R})$, gdzie $SO(n, \mathbb{R})$ jest grupą rzeczywistych macierzy ortogonalnych $n \times n$, $\mathbb{R}^+ \subset \mathbb{R}$ - multiplikatywna grupa liczb rzeczywistych dodatnich, a $GL(n, \mathbb{R})$ - grupa nieosobliwych macierzy rzeczywistych $n \times n$.

Celem pracy jest podanie rozwiązań analitycznych dla tych problemów. Oczywiście nakłada to znaczne ograniczenie na dozwolone potencjały. Z jednej strony, jak już wspomniano, potencjały te powinny być fizycznie interesujące przynajmniej ze względu na ich jakościowe zachowanie się, a z drugiej strony powinny „dopuszczać” ścisłe, analityczne rozwiązania. To założenie doprowadziło do interesujących rezultatów. Okazuje się, że narzucenie tego rodzaju dość drastycznych warunków „wyróżnia” te potencjały, dla których zarówno stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego jak i

stacjonarne równanie Schrödingera są separowalne, a otrzymane równania dają się rozwiązać analitycznie.

Na poziomie klasycznym wyznaczono zmienne działania, znaleziono stałe ruchu oraz wyprowadzono zależność energii od zmiennych działania wraz z dyskusją problemu degeneracji (rezonansu między fundamentalnymi częstościami). W celu wyznaczenia zmiennych działania posłużono się metodą całkowania zespolonego opracowaną przez Maxa Borna w mechanice analitycznej i starszej teorii kwantów [7].

Na poziomie kwantowym uzyskano zarówno quasiklasyczne (oparte na warunkach Bohra-Sommerfelda) jak i ścisłe rozwiązania, przy poszukiwaniu których wykorzystano rozwiniętą przez Rubinowicza metodę wielomianów Sommerfelda. W metodzie tej wyraża się rozwiązania poprzez zwykłe lub konfluentne P -funkcje Riemanna, które są ściśle związane z funkcjami hipergeometrycznymi (zwykłymi bądź konfluentnymi). Narzucenie na funkcje falowe warunków zbieżności prowadzi do tego, że funkcje hipergeometryczne stają się wielomianami, a rozwiązania wyrażają się poprzez te właśnie wielomiany i funkcje elementarne. Równocześnie otrzymujemy widmo wartości własnych energii bądź stałych separacji równania Schrödingera. Ograniczenie się tylko do rozwiązań wyrażających się przez P -funkcje Riemanna jest o tyle uzasadnione, że funkcje te są dobrze zbadane, a ponadto wiele funkcji specjalnych fizyki można przez nie wyrazić. Istnieje też ścisły związek pomiędzy teorią reprezentacji grup Liego, a pewnymi rodzajami tych funkcji.

Uzyskane wyniki zostały opublikowane:

- [1] **A. Martens**, *Dynamics of holonomically constrained affinely-rigid body*, Reports on Mathematical Physics **49** (2002), no. 2/3, 295–303.
- [2] **A. Martens**, *Quantization of affinely-rigid body with constraints*, Reports on Mathematical Physics **51** (2003), no. 2/3, 287–295.
- [3] **A. Martens**, *Hamiltonian dynamics of planar affinely-rigid body*, Journal of Nonlinear Mathematical Physics, vol. **11**, Supplement, (2004), 145–150.
- [4] **A. Martens**, *Quantization of the planar affinely-rigid body*, Journal of Nonlinear Mathematical Physics, vol. **11**, Supplement, (2004), 151–156.
- [5] J. J. Sławianowski, V. Kovalchuk, A. Sławianowska, B. Gołubowska, **A. Martens**, E. E. Rożko, Z. J. Zawistowski, *Invariant geodesic systems on Lie groups and affine models of internal and collective degrees of freedom*, Prace IPPT, no. 7, Warszawa, 2004.

- [6] J. J. Sławianowski, V. Kovalchuk, A. Sławianowska, B. Gołubowska, **A. Martens**, E. E. Rożko, Z. J. Zawistowski, *Affine symmetry in mechanics of collective and internal modes. Part I. Classical models*, Reports on Mathematical Physics, vol. **54** (2004), no. 3, 373–427.
- [7] J. J. Sławianowski, V. Kovalchuk, A. Sławianowska, B. Gołubowska, **A. Martens**, E. E. Rożko, Z. J. Zawistowski, *Affine symmetry in mechanics of collective and internal modes. Part II. Quantum models*, Reports on Mathematical Physics, vol. **55** (2005), no. 1, 1–45.

Wstępne pojęcia dotyczące mechaniki ciał jednorodnie deformowalnych

1.1. Przestrzeń konfiguracyjna

Zakładamy, że przestrzeń fizyczna M i materialna N wyposażone są w struktury euklidesowe (M, V, \rightarrow, g) i $(N, U, \rightarrow, \eta)$ odpowiednio; V i U są przestrzeniami liniowymi translacji odpowiednio w M i N ($\dim M = \dim N = n$). Symbole $g \in V^* \otimes V^*$ i $\eta \in U^* \otimes U^*$ oznaczają tensory metryczne naszych przestrzeni. Dla określenia stopni swobody ciała afinicznie sztywnego istotne są same struktury afiniczne (M, V, \rightarrow) , (N, U, \rightarrow) . Oznaczenie wektorów translacji w obydwu przestrzeniach za pomocą tej samej strzałki (\rightarrow) polepsza ekonomię oznaczeń, nie prowadząc przy tym do żadnych dwuznaczności. Elementy zbioru M symbolizują punkty geometryczne przestrzeni. Zakładamy, że punkty materialne ośrodka są rozróżnialne i „numerujemy” je przy pomocy przestrzeni materialnej N . Model przestrzeni euklidesowej jest zadawalającym opisem geometrii niezbyt wielkich obszarów przestrzeni fizycznej. W każdym razie stosuje się doskonale dla takich obszarów, którymi zajmuje się mechanika ośrodków ciągłych (ogólniej - mechanika ciał odkształcalnych).

Przestrzeń konfiguracyjna ciała afinicznie sztywnego Q_c

$$Q_c := AfI(N, M)$$

składa się z izomorfizmów afinicznych przestrzeni N na M , tzn. odwracalnych odwzorowań afinicznych. Oczywiście $AfI(N, M)$ jest podzbiorem otwartym w $Af(N, M)$ i jego uzupełnienie jest zbiorem miary zero; składa się ono z osobliwych, tzn. degenerujących wymiar odwzorowań afinicznych. Symbolem $Af(N, M)$ oznaczamy jak zwykle zbiór odwzorowań afinicznych przestrzeni N w przestrzeń M . Są to odwzorowania zachowujące relacje afiniczne między punktami.

Mając na uwadze zastosowania praktyczne, będziemy używali innej reprezentacji przestrzeni konfiguracyjnej. Chodzi o to, by oddzielić od siebie stopnie swobody ruchu postępowego i wewnętrznego. Zarówno w makroskopowej teorii sprężystości, jak i w zagadnieniach dynamiki mikroobiektów interesuje nas tylko ruch wewnętrzny.

Umówmy się, że współrzędne Lagrange'a $a^A \in N$ zostaną wybrane w taki sposób, aby ich początek $a^A = 0$ pokrywał się ze środkiem masy w ciele \mathcal{O}

$$\int a^A d\mu(a) = 0,$$

gdzie dodatnia, stała w czasie miara $\mu(a)$ na N opisuje lagranżowski rozkład masy. Przestrzeń konfiguracyjną możemy utożsamić z iloczynem kartezjańskim

$$Q_c = AfI(N, M) \simeq \mathbf{M} \times LI(U, V) = \mathbf{M} \times Q,$$

gdzie $LI(U, V)$ oznacza zbiór izomorfizmów liniowych U na V , będący oczywiście podzbiorem otwartym w $L(U, V)$. Dopelnienie $LI(U, V)$ do pełnego $L(U, V)$ jest zbiorem miary zero, złożonym z osobliwych odwzorowań liniowych. Iloczynowa struktura przestrzeni Q_c pozwala dokonać rozkładu stopni swobody na część translacyjną \mathbf{M} i wewnętrzną $LI(U, V)$. Mechanika ciał odkształcalnych interesuje się głównie częścią wewnętrzną, tzn. ruchem względem środka masy. Ruch ciała afinicznie sztywnego możemy zapisać w postaci

$$x^i(t, a) = \Phi^i_A(t)a^A + r^i(t), \quad \Phi^i_A(t) \in LI(U, V), \quad (1.1)$$

gdzie $\vec{r}(t)$ jest wektorem wodzącym środka masy w przestrzeni fizycznej, a Φ^i_A jest wewnętrzną konfiguracją ciała łączącą współrzędne materialne, lagranżowskie $a^A \in N$ z eulerowskimi $x^i \in M$. Stan deformacji jest opisany przez Φ^i_A (należy jednak pamiętać, że Φ^i_A opisuje także rotacyjne stopnie swobody). Współczynniki Φ^i_A tworzą macierz nieosobliwą, co oznacza fizycznie, że różne cząstki zajmują różne położenia (nie zlepiają się).

Rozważmy n -wymiarowe ciało zamocowane w jednym punkcie. Narzucając takie więzy abstrahujemy od translacyjnych stopni swobody. Modelem przestrzeni fizycznej

M i przestrzeni materialnej N jest n -wymiarowa przestrzeń wektorowa (ze względu na istnienie nieruchomego, wyróżnionego punktu, który utożsamiamy z zerem przestrzeni wektorów swobodnych). Jak już wspominaliśmy, punkty materialne ośrodka są rozróżnialne i możemy określić ich położenie przez podanie współrzędnych względem zewnętrznego układu odniesienia (laboratoryjnego) lub względem układu związanego z ciałem (współtowarzyszącego). Jeśli utożsamimy U i V z \mathbb{R}^n , to $Q = GL(n, \mathbb{R})$. Przestrzeń konfiguracyjna ogólnych deformacji jednorodnych i obrotów ma n^2 wymiarów. Macierz jednostkowa $\mathbb{1} \in GL(n, \mathbb{R})$ odpowiada konfiguracji równowagowej. Rozważania geometryczne przeprowadzamy przy dowolnym n ; oczywiście sens fizyczny mają przypadki $n = 1, 2, 3$.

W przestrzeni konfiguracyjnej $Q = GL(n, \mathbb{R})$ działają dwie naturalne grupy transformacji: lewostronne i prawostronne transformacje $GL(n, \mathbb{R})$ w siebie:

$$\Phi \mapsto \mathcal{A}\Phi, \quad \Phi \mapsto \Phi\mathcal{A}, \quad (1.2)$$

gdzie $\Phi, \mathcal{A} \in GL(n, \mathbb{R})$. Grupy przekształceń lewostronnych i prawostronnych są przemienne ze sobą, ale nie rozłączne. Ich przekrój jest jednowymiarową grupą dylatacji:

$$\Phi \mapsto \lambda\Phi, \quad \lambda \in \mathbb{R}^+.$$

Transformacje eulerowskie (przestrzenne, lewostronne) i lagranżowskie (materialne, prawostronne) w przestrzeni konfiguracyjnej Q wyróżnione są przez samą geometrię stopni swobody. Mają przy tym ściśle określony sens fizyczny. Transformacje eulerowskie są bowiem generowane przez przekształcenia działające w przestrzeni fizycznej, natomiast lagranżowskie odpowiadają przekształceniom samego materiału.

Znając macierz deformacji możemy wprowadzić tensory deformacji Greena \mathcal{G} i Cauchyego \mathcal{C}

$$\mathcal{G} = \Phi^T\Phi, \quad \mathcal{C}^{-1} = \Phi\Phi^T. \quad (1.3)$$

Oczywiście, $\mathcal{G}^T = \mathcal{G}$, $\mathcal{C}^T = \mathcal{C}$. Jeśli Φ jest macierzą ortogonalną, to tensory (1.3) są tensorami jednostkowymi. Tak więc deformacje afiniczne są ogólniejsze od sztywnych obrotów. Tensor Greena jest nieczuły na przestrzenne, zaś tensor Cauchyego na materialne sztywne obroty. Niezmienniki deformacji, tzn. wartości własne symetrycznej macierzy \mathcal{G} (lub, równoważnie \mathcal{C}^{-1}) są niewrażliwe na jednoczesne działanie obrotów lagranżowskich i eulerowskich. Układów tych wielkości jest wiele.

1.2. Wielkości kinematyczne

Jak zwykle w mechanice analitycznej ruch układu w przestrzeni konfiguracyjnej Q opisuje krzywa gładka $\mathbb{R} \ni t \mapsto \Phi(t) \in GL(n, \mathbb{R})$. Prędkość uogólniona $\xi(t)^i_A = \frac{d\Phi^i_A}{dt} \in L(n, \mathbb{R})$ jest gradientem lagranżowskiego pola prędkości $\mathcal{V}(a)$

$$\mathcal{V}^i(a) = \frac{d\Phi^i_A}{dt} a^A,$$

($\mathcal{V}(a)$ przyporządkowuje punktowi materialnemu o współrzędnych odniesienia a^A jego prędkość w danej chwili czasu) przy czym $L(n, \mathbb{R})$ jest zbiorem rzeczywistych macierzy $n \times n$, zaś $GL(n, \mathbb{R}) \subset L(n, \mathbb{R})$ jest otwartym podzbiorem przestrzeni liniowej $L(n, \mathbb{R})$.

Oprócz prędkości uogólnionych będziemy również używali, tzw. quasiprędkości, czyli prędkości nieholonomicznych wyróżnionych przez strukturę geometryczną przestrzeni konfiguracyjnej. Będziemy je nazywali prędkościami afinicznymi. Jest to naturalne, afiniczne uogólnienie pojęcia prędkości kątowej używanego w mechanice ciała sztywnego [41]-[46], [48].

Prędkość afiniczna ciała afinicznie sztywnego znajdującego się w konfiguracji $\Phi \in GL(n, \mathbb{R})$ w układzie laboratoryjnym dana jest wzorem

$$\Omega = \xi \Phi^{-1}, \quad \Omega^i_j = \xi^i_A (\Phi^{-1})^A_j. \quad (1.4)$$

Przy ustalonej konfiguracji Φ znajomość prędkości uogólnionej ξ jest równoważna znajomości quasiprędkości Ω . Nieosobliwość odwzorowania Φ sprawia, że odpowiedniość jest tu wzajemnie jednoznaczna.

Analogicznie, współtowarzyszająca (lagranżowska) prędkość afiniczna ma postać

$$\hat{\Omega} = \Phi^{-1} \xi = \Phi^{-1} \Omega \Phi, \quad \hat{\Omega}^A_B = (\Phi^{-1})^A_i \xi^i_B = (\Phi^{-1})^A_i \Omega^i_j \Phi^j_B. \quad (1.5)$$

Przy dowolnym ustalonym Φ związek między ξ a $\hat{\Omega}$ jest wzajemnie jednoznaczny.

Wielkości Ω , $\hat{\Omega}$ mają jasny sens teorio-grupowy jako elementy algebry Liego grupy $GL(n, \mathbb{R})$. Sugeruje to, by w pewnych zagadnieniach opisywać wewnętrzny stan newtonowski ciała raczej przez parę (Φ, Ω) lub $(\Phi, \hat{\Omega})$ zamiast przez (Φ, ξ) . Jest to wspólna cecha wszystkich układów o teorio-grupowej strukturze stopni swobody. Najbardziej znanym przykładem jest ciało sztywne, gdzie z reguły używa się prędkości kątowych (elementów algebry Liego ortogonalnej grupy ruchów przestrzeni konfiguracyjnej wewnętrznych stopni swobody) zamiast niezbyt wygodnych prędkości uogólnionych. Czyli dla $\Phi \in SO(n, \mathbb{R})$ macierze Ω i $\hat{\Omega}$ są antysymetryczne, a ich elementy są odpowiednio składowymi prędkości kątowych względem układu laboratoryjnego i współtowarzyszającego (włożonego w ciało).

Prędkość afiniczna Ω jest gradientem eulerowskiego pola prędkości v

$$v^i(x) = \Omega^i_j x^j, \quad (1.6)$$

($v(x)$ jest prędkością punktu materialnego, który zajmuje położenie przestrzenne o współrzędnych x^i).

Pojęcie prędkości afinicznej było używane przez Eringenę w jego teorii ośrodków mikromorficznych stopnia 1, tzn. w mechanice kontinuum złożonego z infinityzmalnych ciał afinicznie sztywnych. Używał on dla niej terminu „gyration” [16].

Prędkości afiniczne mają proste własności transformacyjne. Przy transformacjach prawostronnych (1.2) wielkość Ω jest niezmiennicza, natomiast przy lewostronnych $\Phi \mapsto \mathcal{A}\Phi$ ulega zmianie zgodnie ze wzorem

$$\Omega \mapsto \mathcal{A}\Omega\mathcal{A}^{-1}.$$

Natomiast wielkość $\hat{\Omega}$ jest nieczuła na transformacje lewostronne, zaś przy prawostronnych $\Phi \mapsto \Phi\mathcal{A}$ transformuje się zgodnie ze wzorem

$$\hat{\Omega} \mapsto \mathcal{A}^{-1}\hat{\Omega}\mathcal{A}.$$

Energia kinetyczna ciała deformowalnego jednorodnie jest równa sumie energii kinetycznych jego infinityzmalnych elementów. Aby wprowadzić energię kinetyczną musimy dysponować tensorem metrycznym w przestrzeni fizycznej M (możliwe jest też podejście bazujące na znajomości metryki materialnej w przestrzeni N [41], [44], [46]). W zwykłych teoriach spężystości i jej zastosowaniach, należy oczywiście posługiwać się metryką fizyczną, gdy obliczamy energię kinetyczną układu [41], [44], [48], [49]

$$T = \frac{1}{2}g_{ij} \int \mathcal{V}^i(a)\mathcal{V}^j(a)d\mu(a), \quad (1.7)$$

gdzie dodatnia miara $\mu(a)$ opisuje lagranżowski rozkład masy w N . Energia kinetyczna zapisana w postaci macierzowej wyraża się wzorem

$$T = \frac{1}{2}\text{Tr}\left(\frac{d\Phi}{dt}J\frac{d\Phi^T}{dt}\right), \quad (1.8)$$

gdzie symetryczny tensor J jest kwadrupolowym momentem rozkładu masy w przestrzeni materialnej

$$J^{AK} = \int a^A a^K d\mu(a). \quad (1.9)$$

W zgadnieniach trójwymiarowych, a więc najbardziej interesujących fizycznie, zamiast kwadrupola J używa się często, tzw. tensora momentu bezwładności I . Wiąże się on z J za pomocą następującego wzoru [48], [49]

$$I = \text{Tr}J\hat{\mathbb{1}} - J. \quad (1.10)$$

1.3. Wielkości dynamiczne

W mechanice ciał odkształcalnych przeważnie, choć nie zawsze, interesuje nas dynamika ruchu względnego. Bardzo często bada się sytuacje, gdy nie ma ruchu postępowego, a oddziaływania, jakim poddane jest ciało, opisuje się za pomocą dipola rozkładu sił \mathbf{N} , odniesionego do aktualnego środka masy. W stosunku do wielkości \mathbf{N} używa się też terminu „hipersiła” (nomenklatura pochodząca z teorii ośrodków uogólnionych) lub afiniczny moment sił. Hipersiła \mathbf{N} „kręci” wewnętrznymi stopniami swobody i zależy efektywnie od (Φ, ξ, t) (od czasu t , gdy zagadnienie jest nieautonomiczne).

Macierz dipolowego momentu siły możemy zapisać w postaci

$$N^{ij} = \int x^i(a) F^j(\Phi \cdot a, \frac{d\Phi}{dt} \cdot a, t) d\mu(a), \quad (1.11)$$

gdzie \mathbf{F} jest eulerowskim wektorem gęstości siły na jednostkę masy. Zwykle używany moment siły jest podwojoną częścią antysymetryczną \mathbf{N} . Jeśli mamy do czynienia z siłami potencjalnymi, to

$$N^{ij} = -\Phi_A^i \frac{\partial V}{\partial \Phi_A^k} g^{kj},$$

gdzie V jest energią potencjalną.

Przez kinetyczny spin afiniczny - eulerowski \mathbf{K} (nazwy tej używał również Westpfahl [80]) rozumiemy dipolowy rozkład momentu pędu

$$\mathbf{K}^{ij} = \int x^i(a) \mathcal{V}^j(a) d\mu(a),$$

skąd w postaci macierzowej

$$\mathbf{K} = \Phi \mathbf{J} \frac{d\Phi^T}{dt}. \quad (1.12)$$

W stosunku do wielkości tej używa się też terminu „hipermoment” [22], [23]. Podwojona część antysymetryczna \mathbf{K} jest spinem ciała, czyli momentem pędu i ma postać

$$S = \mathbf{K} - \mathbf{K}^T = \Phi \mathbf{J} \frac{d\Phi^T}{dt} - \frac{d\Phi}{dt} \mathbf{J} \Phi^T. \quad (1.13)$$

Zasada d’Alemberta prowadzi do równań ruchu postaci [45], [49]

$$\Phi \mathbf{J} \frac{d^2\Phi^T}{dt^2} = \mathbf{N}, \quad (1.14)$$

lub równoważnie

$$\frac{d^2\Phi}{dt^2} \mathbf{J} \Phi^T = \mathbf{N}^T.$$

Równania ruchu ciała afinicznie sztywnego są prawami bilansu dla spinu afinicznego

$$\frac{d\mathbf{K}}{dt} = \frac{d\Phi}{dt} \mathbf{J} \frac{d\Phi^T}{dt} + \mathbf{N}. \quad (1.15)$$

Asymetryczna część bilansu spinu afinicznego daje nam bilans spinu

$$\frac{dS}{dt} = N - N^T. \quad (1.16)$$

Gdy znika moment siły $N - N^T$ dostajemy stąd prawo zachowania spinu $\frac{dS}{dt} = 0$; S jest wtedy stałą ruchu. Natomiast w wyrażeniu (1.15) widać, że wielkość \mathbf{K} nie jest zachowana nawet dla $N = 0$. Wynika to stąd, że teoria nawet wtedy nie jest afinicznie, lecz tylko metrycznie niezmiennicza. Afiniczna symetria stopni swobody jest złamana przez energię kinetyczną i ograniczona do euklidesowej $SO(n, \mathbb{R}) \subset GL(n, \mathbb{R})$ [42], [45], [48].

Równania ruchu w postaci praw bilansu są szczególnie użyteczne, jeżeli badamy ruch ciał afinicznie sztywnych poddanych dodatkowym więzom. Otóż, nałożenie dodatkowych ograniczeń na przestrzeń konfiguracyjną prowadzi do modyfikacji tych równań. Ruch nieściśliwego ciała afinicznie sztywnego ($Q = SL(n, \mathbb{R}) \subset GL(n, \mathbb{R})$) jest opisywany przez bezśladową część równania (1.15). Natomiast dla ciał o ustalonym kształcie ($Q = SO(n, \mathbb{R}) \times \mathbb{R}^+ = \{\rho R : R \in SO(n, \mathbb{R}), \rho > 0\}$), dla których dopuszczalnymi ruchami są obroty sztywne i dylatacje należy uwzględnić część antysymetryczną równania (1.15) oraz jego ślad. Jeżeli rozważamy sztywne obroty ($Q = SO(n, \mathbb{R})$) to ruch opisywany jest przez antysymetryczną część równania (1.15), a więc równanie (1.16).

1.4. Newtonowska i hamiltonowska przestrzeń stanów

W mechanice analitycznej używa się dwóch typów przestrzeni stanów: newtonowskiej P_N i hamiltonowskiej P_H . Pierwsza z nich, mówiąc nieprecyzyjnie, lecz obrazowo, powstaje z przestrzeni konfiguracyjnej w ten sposób, że do opisu aktualnego stanu układu, oprócz zmiennych położeniowych (opisujących konfigurację) włączamy prędkości. Zbiór $\{(\Phi, \frac{d\Phi}{dt})\} = \{(\Phi, \xi)\} = GL(n, \mathbb{R}) \times L(n, \mathbb{R})$ jest newtonowską przestrzenią stanów. Newtonowska przestrzeń stanów, czyli przestrzeń położenia i prędkości jest pojęciem stosowanym do wszystkich układów mechanicznych rządzonego prawami dynamiki Newtona - zarówno zachowawczych jak i dysypatywnych. Natomiast hamiltonowska przestrzeń stanów P_H , czyli przestrzeń fazowa służy wyłącznie do opisu układów rządzonego równaniami Eulera-Lagrange'a wyprowadzonymi z zasady wariacyjnej, tzn. zasady najmniejszego (a raczej stacjonarnego) działania. Wyklucza to w zasadzie układy dysypatywne, w których występuje tarcie. Przestrzeń fazową buduje się z przestrzeni konfiguracyjnej w ten sposób, że do układu zmiennych położeniowych dołącza się tzw. pędy kanoniczne, czyli wektory kowariantne. Jak wiadomo, te ko-wektory są pojęciowo tożsame z rzeczywistymi funkcjami liniowymi od wektorów kontrawa-

riantnych, czyli wszystkich możliwych prędkości. Newtonowska przestrzeń stanów jest wiązką styczną TQ do Q , natomiast przestrzeń fazowa, czyli hamiltonowska przestrzeń stanów jest wiązką ko-styczną T^*Q .

Jak wiadomo z mechaniki analitycznej, oddziaływania występujące w układzie o dynamice wariacyjnej, scharakteryzowane są w pełni przez jedną funkcję Lagrange'a zależną od położeń w przestrzeni konfiguracyjnej Q , prędkości uogólnionych i ewentualnie czasu. W naszym przypadku $L(\Phi, \xi) = T(\Phi, \xi) - V(\Phi)$, gdzie T opisuje energię kinetyczną, zaś V - potencjalną. Aby przejść od prędkości do pędów uogólnionych musimy wykonać przekształcenie Legendre'a [3], [38], [48], które zależy jawnie od funkcji Lagrange'a

$$\pi^A_i = \frac{\partial L}{\partial \xi^i_A}, \quad (1.17)$$

gdzie π oznacza uogólniony pęd kanoniczny ruchu wewnętrznego. Hamiltonowską (wewnętrzną) przestrzenią fazową ciała afinicznie sztywnego jest więc rozmaitość $P_H = GL(n, \mathbb{R}) \times L(n, \mathbb{R})$, która składa się z uporządkowanych dwójek (Φ, π) .

Zamiast pędów uogólnionych można również używać wielkości nieholonomicznych, tzw. quasipędów [41], [46], [48]. Rozróżniamy dwa rodzaje quasipędów: eulerowskie (przestrzenne) Σ

$$\Sigma = \Phi\pi, \quad \Sigma^i_j = \Phi^i_A \pi^A_j, \quad (1.18)$$

i lagranżowskie (materialne) $\hat{\Sigma}$

$$\hat{\Sigma} = \pi\Phi, \quad \hat{\Sigma}^A_B = \pi^A_i \Phi^i_B. \quad (1.19)$$

Wielkości Σ i $\hat{\Sigma}$ są kanonicznymi quasipędami ruchu wewnętrznego lub, mówiąc inaczej, kanonicznymi spinami afinicznymi. Są one hamiltonowskimi generatorami przestrzennych i materialnych transformacji (1.2). Przy transformacjach prawostronnych wielkość Σ jest niezmiennicza, tzn. $\Sigma \mapsto \Sigma$, natomiast przy lewostronnych ulega zmianie zgodnie ze wzorem

$$\Sigma \mapsto \mathcal{A}\Sigma\mathcal{A}^{-1}.$$

Natomiast wielkość $\hat{\Sigma}$ jest nieczuła na transformacje lewostronne, tzn. $\hat{\Sigma} \mapsto \hat{\Sigma}$, zaś przy prawostronnych transformuje się zgodnie ze wzorem

$$\hat{\Sigma} \mapsto \mathcal{A}^{-1}\hat{\Sigma}\mathcal{A}.$$

W przypadku ruchu obrotowego $\Phi \in SO(n, \mathbb{R})$ wielkości Σ i $\hat{\Sigma}$ są antysymetryczne, a ich niezależne elementy są składowymi momentu pędu odpowiednio w układzie laboratoryjnym i współtowarzyszącym.

Ponieważ dalej rozpatrywane będą ogólne deformacje jednorodne i obroty spełniające pewne dodatkowe warunki, wygodnie będzie więc przyjąć, że elementy macierzy deformacji Φ wyrażają się jednoznacznie przez parametry q^i ($i=1, \dots, f$, gdzie f jest liczbą stopni swobody). Takimi parametrami mogą być inaczej ponumerowane elementy macierzy Φ . Założenie to prowadzi do otrzymania w miejsce Q pewnej przestrzeni konfiguracyjnej Q_q , w której forma energii kinetycznej (1.7) indukuje tensor metryczny G ($G_{ij}(q) = G_{ji}(q)$). Energię kinetyczną możemy zapisać w postaci

$$T = \frac{\mu}{2} G_{ij}(q) \frac{dq^i}{dt} \frac{dq^j}{dt},$$

gdzie parametr μ został wybrany w związku z przyszłymi rozważaniami.

Przekształcenie Legendre'a odwzorowuje newtonowską przestrzeń stanów w hamiltonowską

$$p_i = \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}^i},$$

gdzie p_i są pędami uogólnionymi kanonicznie sprzężonymi do q^i . Możemy zbudować Hamiltonian

$$H(q, p) = T(q, p) + V(q), \quad T(q, p) = \frac{1}{2\mu} G^{ij} p_i p_j,$$

w którym energia potencjalna zależy od parametrów q^i , tak że $V = V(q^i) = V(\Phi(q^i))$.

1.5. Stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego

W mechanice hamiltonowskiej istnieją rozmaite metody poszukiwania ścisłych rozwiązań zagadnień nieliniowych. Najbardziej znaną metodą jest poszukiwanie całki zupełnej równania Hamiltona-Jacobiego metodą separacji zmiennych. Pozwala to sprowadzić zagadnienie do kwadratur, co w mechanice nieliniowej uważa się już za rozwiązanie, nawet jeśli pojawiają się funkcje nieelementarne.

Układy mechaniczne, dla których istnieją takie współrzędne $p_i = p_i(q^i)$, gdzie q^i są współrzędnymi uogólnionymi, a p_i pędami sprzężonymi z nimi kanonicznie i p_i jest funkcją tylko q^i z tym samym wskaźnikiem i nazywamy układami separowalnymi. Nazwa pochodzi stąd, że w tych przypadkach rozwiązać możemy cząstkowe równanie różniczkowe Hamiltona-Jacobiego przez rozdzielenie, czyli separację zmiennych. Otrzymujemy je szukając funkcji tworzącej $S(q^i, P_i)$ przekształcenia kanonicznego [3], [38], [39]

$$\sum_{i=1}^f (p_i dq^i + Q^i dP_i) = dS(q^i, P_i), \quad (1.20)$$

które zmienne pierwotne q^i i p_i zastępuje zmiennymi Q^i , P_i , dla których funkcja Hamiltona $H(q^i, p_i)$ jest wyłącznie tylko funkcją pędów P_i , tzn. $H(q^i, p_i) = H(P_i)$ i Q^i są współrzędnymi cyklicznymi. Tu, jak i w następnych rozważaniach zakładamy, że Hamiltoniany nie zależą od czasu. Tak więc, pędy P_i są wielkościami stałymi. Wynika to z faktu, że na mocy (1.20) ważne są również dla nowych zmiennych Q^i , P_i równania Hamiltona

$$\frac{dQ^i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial P_i}, \quad \frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial Q^i},$$

a więc $P_i = \text{const}$, gdy $H = H(P_i)$.

Ponieważ według (1.20) jest

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q^i}, \quad (1.21)$$

to w przypadku zagadnień niezależnych od czasu otrzymujemy dla funkcji tworzącej S cząstkowe równanie różniczkowe

$$H\left(q^i, \frac{\partial S}{\partial q^i}\right) = E, \quad (1.22)$$

zwane stacjonarnym równaniem Hamiltona-Jacobiego (E jest energią układu). Jeżeli dla (1.22) uda się znaleźć rozwiązanie w postaci

$$S = \sum_{i=1}^f S_i(q^i), \quad (1.23)$$

gdzie $S_i(q^i)$ zależy wyłącznie od q^i mającego ten sam wskaźnik i co S_i , to wówczas mówimy, że rozwiązaliśmy (1.22) przez separację zmiennych. Gdy rozwiązanie S równania (1.22) ma ilość stałych całkowania równą ilości zmiennych q^i , tzn. ilości f stopni swobody danego układu mechanicznego, to takie rozwiązanie nazywamy zupełnym. Oznaczając te stałe całkowania literami P_i możemy uważać

$$S = S(q^1, \dots, q^f; P_1, \dots, P_f) \quad (1.24)$$

za funkcję tworzącą przekształcenia kanonicznego (1.20). Ponieważ (1.24) jest rozwiązaniem równania (1.22), to po wstawieniu (1.24) w równanie (1.22) funkcja Hamiltona (1.22) przechodzi w funkcję $H(P_i) = E$ stałych całkowania P_i . Ostatecznie z (1.21), (1.23) i (1.24) wynika, że $p_i = \frac{dS_i(q^i; P_1, \dots, P_f)}{dq^i}$, tak że pęd p_i zależy jedynie od współrzędnej q^i mającej ten sam wskaźnik i , co p_i .

1.6. Zmienne ką-t-działanie

Zmienne działania J_i dla wspomnianych wcześniej układów separowalnych opierają się na wielkościach [3], [39]

$$J_i = \oint \frac{dS_i(q^i, P)}{dq^i} dq^i, \quad (i = 1, \dots, f). \quad (1.25)$$

W równaniu tym występuje niezależna od czasu funkcja działania

$$S = S(q, P) = \sum_{i=1}^f S_i(q^i, P) \quad (1.26)$$

jako funkcja f współrzędnych q^i i f stałych całkowania P_i . Litery q, P występujące w powyższych wzorach bez wskaźników oznaczają przy tym całe zespoły współrzędnych q^i, \dots, q^f i stałych P_i, \dots, P_f .

Za pomocą f równań (1.25) obliczyć możemy stałe P jako funkcje stałych J , tzn.

$$P_i = P_i(J) \quad (1.27)$$

i wstawić je w poszczególne funkcje $S_i(q^i, P)$. Otrzymujemy wówczas poszczególne $S_i(q^i, P)$, a więc również ich sumę (1.26) jako funkcję S^0

$$S = S^0(q, J) = \sum_{i=1}^f S_i^0(q^i, J) \quad (1.28)$$

współrzędnych q i stałych J .

Ponieważ (1.26) jest rozwiązaniem cząstkowego równania różniczkowego Hamiltona-Jacobiego

$$H\left(q, \frac{\partial S(q, P)}{\partial q}\right) = H(P) = E, \quad (1.29)$$

to (1.28) spełnia równanie, które otrzymujemy z (1.29) na mocy (1.27)

$$H\left(q, \frac{\partial S^0(q, J)}{\partial q}\right) = H(J) = E. \quad (1.30)$$

Funkcja działania $S^0(q, J)$ różni się bowiem od funkcji działania $S(q, P)$ tylko tym, że stałe P na mocy (1.27) zostały zastąpione przez stałe J .

Funkcję (1.28) możemy uważać również za niezależną od czasu funkcję tworzącą przekształcenia kanonicznego

$$\sum_{i=1}^f (p_i dq^i + \Theta^i dJ_i) = dS^0(q, J) \quad (1.31)$$

między pierwotnymi zmiennymi q, p i nowymi Θ, J . Ze względu na to, że pomiędzy zespołami zmiennych q, p i Θ, J istnieje przekształcenie kanoniczne niezależne od czasu, również dla zmiennych Θ, J ważne są równania Hamiltona z tą samą funkcją Hamiltona, co w przypadku zmiennych q, p . Ponieważ funkcja Hamiltona w nowych zmiennych Θ, J zależy tylko od pędów J , to z pierwszej grupy równań Hamiltona w tych zmiennych

$$\frac{dJ_i}{dt} = -\frac{\partial H(J)}{\partial \Theta^i}, \quad \frac{d\Theta^i}{dt} = \frac{\partial H(J)}{\partial J_i}, \quad (1.32)$$

wnioskujemy ze względu na $\frac{\partial H(J)}{\partial \Theta^i} = 0$, że pędy J_i (jak to zresztą wynika już z (1.25)) nie zależą od czasu, są stałe. Z uwagi na to również i wielkości zwane podstawowymi częstościami drgań

$$\nu^i = \frac{\partial H(J)}{\partial J_i} \quad (1.33)$$

są stałe, tak że z drugiej grupy równań Hamiltona (1.32) otrzymujemy

$$\Theta^i(t) = \nu^i t + \epsilon^i,$$

gdzie ϵ^i są stałymi. Zmienne działania J (J ma wymiar działania) wraz ze zmiennymi kątowymi Θ tworzą układ współrzędnych kanonicznych działanie-kąt.

W niniejszej pracy zajmujemy się zagadnieniami separowalnymi, a więc sprowadzalnymi do kwadratur. Szczególny nacisk położony jest na modele ściśle rozwiązalne, w których wyrażenie podcałkowe dla zmiennych działania będzie dawało się sprowadzić (przez odpowiednią zamianę zmiennych) do postaci

$$R(x, \sqrt{ax^2 + bx + c}), \quad (1.34)$$

gdzie R jest wymierną funkcją od dwóch zmiennych. Wiadomo, że w zasadzie całki nieoznaczone z wyrażeń (1.34) dają się elementarnie obliczyć przez podstawienia Eulera. Następnie zmienne działania można wyrazić jako odpowiednie całki oznaczone, a więc podwojone wartości całek nieoznaczonych wziętych w granicach jakimi są punkty zawracania. Procedura taka jest jednak rachunkowo bardzo zawiła i nastęrcza mnóstwo okazji do błędów. Znacznie prościej jest policzyć wprost całki oznaczone dla zmiennych działania, posługując się metodą całkowania zespolonego. W tym celu wyrażenie przedłużamy analitycznie na całą płaszczyznę zespoloną. Mówiąc precyzyjniej, z osi rzeczywistej usuwamy cięcie łączące punkty zawracania; są one punktami rozgałęzienia dla odpowiedniego wyrażenia zespolonego. W obszarze otrzymanym z \mathbb{C} po usunięciu cięcia wyrażenie podcałkowe jest jednoznaczne (po ustaleniu konwencji znaku).

Zmienną działania:

$$J = \oint R(x, \sqrt{ax^2 + bx + c}) dx = 2 \int_{x_{min}}^{x_{max}} R(x, \sqrt{ax^2 + bx + c}) dx, \quad (1.35)$$

(x_{min}, x_{max} są punktami zawracania, tzn. miejscami zerowymi wyrażenia pod pierwiastkiem) można wtedy zapisać w postaci

$$J = \oint_C R(z, \sqrt{az^2 + bz + c}) dz, \quad (1.36)$$

gdzie C jest konturem infinitezymalnie okrężającym cięcie.

Można łatwo wykazać, że wyrażenie to daje się przekształcić do postaci:

$$J = -2\pi i \sum_a \text{res}_{z_a}, \quad (1.37)$$

gdzie z_a są biegunami zespolonego wyrażenia podcałkowego $R(z, \sqrt{az^2 + bz + c})$, wliczając (jeśli istnieje) biegun w nieskończoności. Ta maksymalnie ekonomiczna metoda obliczania zmiennych działania była, jak już wspomniano, intensywnie wykorzystywana przez Maxa Borna w starszej teorii kwantów [7].

Gdy z_a jest biegunem rzędu m to:

$$\text{res}_{z_a} = \frac{1}{(m-1)!} \lim_{z \rightarrow z_a} \frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}} \left[(z - z_a)^m R(z, \sqrt{az^2 + bz + c}) \right]. \quad (1.38)$$

1.7. Warunki kwantowe Bohra-Sommerfelda

Zanim sformułujemy warunki kwantowe Bohra-Sommerfelda przybliżymy w skrócie kilka pojęć z teorii wielokrotnie periodycznych układów mechanicznych [7], [39], [73], [74]. Do klasy tych układów mechanicznych należą też układy separowalne.

Przyjmujemy, że zmienne działania są argumentami Hamiltonianu. Zakładamy, że ich liczba jest zredukowana o ile to możliwe, tzn. wprowadźmy dla układu o f stopniach swobody takie zmienne kąta-działanie $\Theta^1, \dots, \Theta^f, J_1, \dots, J_f$, że tylko k wielkości działania, $k \leq f$, J_1, \dots, J_k są argumentami Hamiltonianu

$$H = E(J_1, \dots, J_k)$$

i między fundamentalnymi częstościami

$$\nu^a = \frac{\partial E}{\partial J_a}, \quad a = 1, \dots, k,$$

nie ma tożsamości postaci

$$\sum_{a=1}^k m_a \nu^a = 0,$$

gdzie całkowite współczynniki m_a są niezależne od J i nie wszystkie równe zero. Wtedy mówimy, że układ jest $(f - k)$ -krotnie zdegenerowany lub k -periodyczny, ponieważ występuje k istotnie niezależnych okresów [7], [39], [57]. Tak więc, każda trajektoria leży w całości na jakiejś podrozmaitości Lagranżowskiej danej równaniami $J_i = \text{const}, i = 1, \dots, f$, ale ponadto topologiczne domknięcie każdej trajektorii jest k -wymiarowym izotropowym torusem. Jeśli $k = f$ wtedy mówimy, że układ jest klasycznie niezdegenerowany, natomiast jeśli $k = 1$ wtedy występuje całkowita degeneracja. W pierwszym przypadku trajektorie są gęste na rozmaitości Lagranżowskiej $J_i = \text{const}, i = 1, \dots, f$, podczas gdy w drugim przypadku są zamknięte (wszystkie ruchy są periodyczne).

Podamy teraz warunki kwantowe Bohra-Sommerfelda dla układów wielokrotnie periodycznych. Żądamy, aby w stanie kwantowym układu mechanicznego o k stopniach periodyczności pędy J_1, \dots, J_k określające wartość energii, tzn. funkcji Hamiltona, przyjmowały wartości

$$J_a = n_a h, \quad a = 1, \dots, k, \quad (1.39)$$

gdzie n_a jest liczbą naturalną lub całkowitą, zależną od tego czy ruch w danym stopniu swobody jest oscylacją między punktami zawracania czy libracją, tzn. cyrkulacją dookoła pewnego kąтового zakresu w przestrzeni konfiguracyjnej. Prowadzi to do poziomów energetycznych postaci

$$E_{n_1 \dots n_k} = E(n_1 h, \dots, n_k h).$$

1.8. Przejście do teorii kwantowej

Język hamiltonowski, pędogowy dostarcza wielu efektywnych metod rachunkowych, jak np. metoda separacji zmiennych w równaniu Hamiltona-Jacobiego. Poza tym, hamiltonowskie sformułowanie mechaniki jest niezbędnym krokiem przy przejściu do teorii kwantowej. Kwantowa wersja teorii jest zaś konieczna, gdy chcemy stosować afiniczny model stopni swobody w zagadnieniach mikroskopowych, jak np. teorii drgań molekuł.

Dzięki istnieniu tensora metrycznego G przestrzeń konfiguracyjna jest przestrzenią Riemanna. Występuje na niej naturalna miara $\tilde{\mu}$ wyróżniona przez ten tensor określona jako

$$d\tilde{\mu}(q) = \sqrt{|G|} d^f q, \quad (1.40)$$

gdzie $|G| = \det G$. Możemy zatem określić na Q_q funkcyjną przestrzeń Hilberta $L^2(Q_q, \tilde{\mu}(q))$ z iloczynem skalarnym [27]

$$\langle \Psi_1(q) | \Psi_2(q) \rangle = \int_{Q_q} \Psi_1^*(q) \Psi_2(q) d\tilde{\mu}(q), \quad (1.41)$$

gdzie $\Psi_1(q)$, $\Psi_2(q)$ są funkcjami falowymi.

W mechanice kwantowej wielkościom fizycznym przypisujemy operatory. Operator Hamiltona \hat{H} ma następującą postać

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(q), \quad (1.42)$$

gdzie Δ jest operatorem Laplace'a-Beltramiego. Jego działanie na funkcję falową wyraża się wzorem

$$\Delta \Psi = G^{ij} \nabla_i \nabla_j \Psi = \frac{1}{\sqrt{|\det G|}} \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{|\det G|} G^{ij} \frac{\partial \Psi}{\partial q^j} \right), \quad (1.43)$$

gdzie ∇ jest operatorem różniczkowania kowariantnego. Można powiedzieć, że opisana powyżej procedura jest w gruncie rzeczy identyczna z Schrödingerowską kwantyzacją, kiedy w miejsce klasycznych pędów wprowadzamy operatory różniczkowe.

Założeniem pracy jest rozwiązanie stacjonarnego równania Schrödingera

$$\hat{H} \Psi(q^1, \dots, q^f) = E \Psi(q^1, \dots, q^f). \quad (1.44)$$

Zastosujemy metodę separacji zmiennych. Biorąc

$$\Psi(q^1, \dots, q^f) = f_{q^1}(q^1) f_{q^2}(q^2) \dots f_{q^f}(q^f)$$

dostajemy, o ile separacja jest możliwa, dla każdej z funkcji $f_{q^i}(q^i)$ równanie postaci [39], [40]

$$\frac{d}{dx} \left(\mathbf{p}(x) \frac{df(x)}{dx} \right) - (\mathbf{q}(x) - \lambda \varrho(x)) f(x) = 0, \quad (1.45)$$

gdzie x jest jedną ze zmiennych q^i , $f(x)$ funkcją $f_{q^i}(q^i)$, λ parametrem własnym, który wyraża się przez stałe separacji powyższego równania lub parametr E , zaś $\mathbf{q}(x)$ zawiera informacje o zależności energii potencjalnej od zmiennej x . Równanie (1.45) jest równaniem typu Sturm-Liouville'a [9] i będziemy je rozwiązywać metodą wielomianów Sommerfelda [39].

Od dwu funkcji własnych $f_1(x)$, $f_2(x)$ przynależnych do dwu różnych wartości własnych λ_1 , λ_2 żądamy, aby były one względem siebie ortogonalne. Aby funkcje $f_1(x)$, $f_2(x)$ były względem siebie ortogonalne, musi być

$$\int_{x_1}^{x_2} f_2^*(x) f_1(x) \varrho(x) dx = 0. \quad (1.46)$$

Oprócz tego oczywiście każda funkcja własna f musi się dać unormować, a więc całka analogiczna do całki (1.46)

$$\int_{x_1}^{x_2} f^*(x)f(x)\varrho(x)dx \quad (1.47)$$

musi być zbieżna. W obu całkach (1.46), (1.47) występuje to samo $\varrho(x)$ jako funkcja wagowa.

Metoda wielomianów Sommerfelda

W teorii kwantów określa się w ogólności zagadnienia własne w przestrzeni konfiguracyjnej. Przez separację zmiennych przeprowadza się je jednak - o ile to możliwe - w jednowymiarowe zagadnienia własne. Takie zagadnienia dane są bardzo często przez równania różniczkowe drugiego rzędu w postaci samosprężonej (1.45), tzn.

$$\frac{d}{dx} \left(\mathbf{p}(x) \frac{df(x)}{dx} \right) - (\mathbf{q}(x) - \lambda \varrho(x)) f(x) = 0. \quad (2.1)$$

Do rozwiązywania pewnej dość obszernej klasy często w teorii kwantów spotykanych zagadnień własnych (2.1) podał A. Sommerfeld pewną metodę, którą nazywamy metodą wielomianów [39], [40]. Używając jej zakładamy, że zagadnienie własne (2.1) możemy rozwiązać przy pomocy funkcji o postaci $f(x) = \mathcal{E}(x)\Phi(\mathbf{x})$, gdzie $\Phi(\mathbf{x})$ jest rozwiązaniem równania różniczkowego drugiego rzędu

$$(A_2 + B_2 x^h) x^2 \frac{d^2 \Phi(\mathbf{x})}{dx^2} + 2(A_1 + B_1 x^h) x \frac{d\Phi(\mathbf{x})}{dx} + (A_0 + B_0 x^h) \Phi(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (2.2)$$

oraz $A_i, B_i = \text{const}$, $i = 0, 1, 2$. Postać funkcji $\mathcal{E}(x)$ jest określona przez równania różniczkowe (2.1) i (2.2) dla funkcji $f(x)$ i $\Phi(\mathbf{x})$. Ponieważ poza tym postać rozwiązań równania różniczkowego (2.2) jest znana, można ustalić postać rozwiązań zagadnienia własnego (2.1), jeżeli zastosować możemy do niego metodę Sommerfelda. Okazuje się, że

$$f(x) = \mathbf{p}(x)^{-1/2} P(\xi), \quad (2.3)$$

gdzie $\mathbf{p}(x)$ jest funkcją występującą w równaniu (2.1), a $P(\xi)$ - funkcją Riemanna P w jej zwykłej lub konfluentnej postaci. Między zmiennymi x i ξ istnieje przy tym związek

$$\xi = \kappa x^h, \quad (2.4)$$

gdzie κ i h są stałymi. Dowodu na prawdziwość wzoru (2.3) tu nie przeprowadzamy. Wykorzystamy tylko znajomość postaci rozwiązań (2.3), aby podać wzory do szybkiego i prostego wyznaczania wartości i funkcji własnych większości zagadnień własnych teorii kwantów, które można rozwiązać przy pomocy metody wielomianów.

2.1. Zwykła funkcja Riemanna P

W celu podania warunków na to, aby rozwiązanie zagadnienia własnego (2.1) miało postać (2.3), gdzie P oznacza zwykłą funkcję Riemanna, musimy zaznajomić się obecnie z własnościami tej funkcji.

Zwykłą funkcją Riemanna P nazywamy rozwiązanie równania różniczkowego drugiego rzędu [39], [40]

$$\frac{d^2 P}{d\xi^2} + \left(\frac{1 - \alpha - \alpha'}{\xi} - \frac{1 - \gamma - \gamma'}{1 - \xi} \right) \frac{dP}{d\xi} + \left(\frac{\alpha\alpha'}{\xi} + \frac{\gamma\gamma'}{1 - \xi} - \beta\beta' \right) \frac{1}{\xi(1 - \xi)} P = 0. \quad (2.5)$$

Funkcja P zależy od sześciu parametrów $\alpha, \beta, \gamma, \alpha', \beta', \gamma'$, występujących w równaniu (2.5), pomiędzy którymi postulujemy związek

$$\alpha + \beta + \gamma + \alpha' + \beta' + \gamma' = 1, \quad (2.6)$$

tak, że funkcja P zawiera tylko pięć liniowo niezależnych parametrów. Równanie różniczkowe (2.5) funkcji P ma trzy regularne punkty osobliwe $\xi = 0, 1$ i ∞ .

W celu uwidocznienia zależności jakiegokolwiek rozwiązania równania (2.5) od parametrów $\alpha, \beta, \gamma, \alpha', \beta', \gamma'$ zapisujemy rozwiązanie to w postaci używanej już przez B. Riemanna, czyli

$$P = P \begin{pmatrix} 0 & \infty & 1 \\ \alpha & \beta & \gamma & \xi \\ \alpha' & \beta' & \gamma' \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Następnie będziemy korzystać z twierdzenia, które mówi, że funkcja P (2.7) pomnożona przez funkcję $\xi^\delta(1 - \xi)^\varepsilon$, gdzie δ i ε są dowolnymi współczynnikami jest znowu

funkcją P , ale zależną od innych parametrów $\alpha, \beta, \gamma, \alpha', \beta', \gamma'$. Otrzymujemy wówczas związek

$$\xi^\delta(1-\xi)^\varepsilon P \begin{pmatrix} 0 & \infty & 1 \\ \alpha & \beta & \gamma & \xi \\ \alpha' & \beta' & \gamma' \end{pmatrix} = P_0 \begin{pmatrix} 0 & \infty & 1 \\ \alpha + \delta & \beta - \delta - \varepsilon & \gamma + \varepsilon & \xi \\ \alpha' + \delta & \beta' - \delta - \varepsilon & \gamma' + \varepsilon \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Dowodu na prawdziwość tego twierdzenia tu nie przeprowadzamy. Parametry w funkcji P oznaczonej przez P_0 występującej po prawej stronie powyższego równania spełniają również zależność (2.6).

Jeśli dobierzemy odpowiednio wartości stałych δ i ε w związku (2.8) to możemy liczbę parametrów niezależnych występujących w P zredukować do trzech. Robimy to, aby rozwiązanie równania różniczkowego funkcji Riemanna P sprowadzić do rozwiązania równania zwykłej funkcji hipergeometrycznej F

$$\xi(1-\xi) \frac{d^2 F(\xi)}{d\xi^2} + [c - (a+b+1)\xi] \frac{dF(\xi)}{d\xi} - abF(\xi) = 0. \quad (2.9)$$

Równanie to nazywa się hipergeometrycznym równaniem różniczkowym albo równaniem Gaussa [69].

W przypadku, gdy $\delta = -\alpha$ i $\varepsilon = -\gamma$ na mocy (2.8) dostajemy

$$P \begin{pmatrix} 0 & \infty & 1 \\ \alpha & \beta & \gamma & \xi \\ \alpha' & \beta' & \gamma' \end{pmatrix} = \xi^\alpha(1-\xi)^\gamma P_0 \begin{pmatrix} 0 & \infty & 1 \\ 0 & \alpha + \beta + \gamma & 0 & \xi \\ \alpha' - \alpha & \alpha + \beta' + \gamma & \gamma' - \gamma \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Zatem, otrzymujemy dla funkcji P_0 występującej po prawej stronie równania (2.10) ze względu na (2.5) następujące równanie

$$\frac{d^2 P_0}{d\xi^2} + \left(\frac{1 - \alpha' + \alpha}{\xi} - \frac{1 - \gamma' + \gamma}{1 - \xi} \right) \frac{dP_0}{d\xi} - \frac{(\alpha + \beta + \gamma)(\alpha + \beta' + \gamma)}{\xi(1 - \xi)} P_0 = 0. \quad (2.11)$$

Powyższe równanie jest identyczne z równaniem różniczkowym (2.9), przy czym ze względu na (2.6) jest

$$a = \alpha + \beta + \gamma, \quad b = \alpha + \beta' + \gamma, \quad c = 1 - \alpha' + \alpha. \quad (2.12)$$

Z (2.10) wynika, że dowolną zwykłą funkcję Riemanna P możemy przedstawić w postaci

$$P = \xi^\alpha(1-\xi)^\gamma F, \quad (2.13)$$

gdzie F jest dowolną funkcją hipergeometryczną (dowolnym rozwiązaniem równania różniczkowego (2.9)).

Równanie różniczkowe (2.9) funkcji hipergeometrycznej ma dwa liniowo niezależne rozwiązania, które możemy przedstawić w postaci szeregów zbieżnych wokół punktów osobliwych tego równania $\xi = 0, 1$ i ∞ . Szukając rozwiązań w postaci szeregu potęgowego wokół punktu $\xi = 0$, a więc w postaci [39]

$$F = \xi^\sigma \sum_{m=0}^{\infty} a_m \xi^m, \quad a_0 \neq 0,$$

otrzymujemy na wykładnik σ równanie drugiego stopnia zwane równaniem podstawowym, z którego wynikają dla σ dwie wartości $\sigma = 0$ i $\sigma' = 1 - c$. Jeśli różnica $\sigma - \sigma' = c - 1$ obu pierwiastków równania podstawowego nie znika i nie jest liczbą całkowitą, dodatnią albo ujemną, to oba rozwiązania równania (2.9) odpowiadające $\sigma = 0$ i $\sigma' = 1 - c$ są w przedziale $(0, 1)$ regularne i mają postaci

$$F = F(a, b; c; \xi) = 1 + \frac{cb}{1!c} \xi + \frac{a(a+1)b(b+1)}{2!c(c+1)} \xi^2 + \dots \quad (2.14)$$

oraz

$$F = \xi^{1-c} F(a - c + 1, b - c + 1; 2 - c; \xi). \quad (2.15)$$

Ostatecznie otrzymujemy na mocy (2.12), (2.13) oraz (2.14) następujące rozwiązanie równania różniczkowego (2.5) funkcji Riemanna P

$$P = \xi^\alpha (1 - \xi)^\gamma F(\alpha + \beta + \gamma, \alpha + \beta' + \gamma; 1 + \alpha - \alpha'; \xi). \quad (2.16)$$

Okazuje się, że funkcja F (2.15) daje nam rozwiązanie równania (2.5), które otrzymujemy przez przemianę stałych α i α' w funkcji (2.16)

$$P = \xi^{\alpha'} (1 - \xi)^\gamma F(\alpha' + \beta + \gamma, \alpha' + \beta' + \gamma; 1 + \alpha' - \alpha; \xi). \quad (2.17)$$

Oba rozwiązania są różne od siebie, gdy $1 - c$ nie jest liczbą całkowitą lub zerem, tzn. ze względu na (2.12), gdy $\alpha - \alpha'$ nie jest liczbą całkowitą lub zerem.

Możemy również wyrazić rozwiązania równania różniczkowego (2.9) funkcji hipergeometrycznej przez szeregi potęgowe wokół obu pozostałych punktów osobliwych $\xi = 1$ i $\xi = \infty$. Otrzymujemy wówczas następujące rozwiązania równania (2.5) funkcji P [39]

$$P = \xi^\alpha (1 - \xi)^\gamma F(\alpha + \beta + \gamma, \alpha + \beta' + \gamma; 1 + \gamma - \gamma'; 1 - \xi), \quad (2.18)$$

$$P = \xi^\alpha (1 - \xi)^{\gamma'} F(\alpha + \beta + \gamma', \alpha + \beta' + \gamma'; 1 + \gamma' - \gamma; 1 - \xi), \quad (2.19)$$

$$P = \xi^{-\beta-\gamma} (1 - \xi)^\gamma F(\alpha + \beta + \gamma, \alpha' + \beta + \gamma; 1 + \beta - \beta'; 1/\xi), \quad (2.20)$$

$$P = \xi^{-\beta'-\gamma} (1 - \xi)^\gamma F(\alpha + \beta' + \gamma, \alpha' + \beta' + \gamma; 1 + \beta' - \beta; 1/\xi). \quad (2.21)$$

Szereg potęgowy, przez który wyraża się funkcja F , może być nieskończony lub może się urywać przechodząc w wielomian. Dzieje się to wówczas, gdy pierwszy lub drugi współczynnik w niej występujący, a więc np. współczynnik a lub b w $F(a, b; c; \xi)$ jest ujemną liczbą całkowitą. Jak z szeregu (2.14) wynika jest np. $F(-n, b; c; \xi)$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) wielomianem stopnia n -tego zmiennej ξ . Natomiast jeśli szeregi potęgowe nie urywają się, rozwinięcia (2.16) i (2.17) są zbieżne na płaszczyźnie zmiennej zespolonej ξ w obszarze kołowym $|\xi| < 1$, rozwinięcia (2.18) i (2.19) - w obszarze $|\xi - 1| < 1$, a rozwinięcia (2.20) i (2.21) - w obszarze $|1/\xi| < 1$.

2.2. Rozwiązywanie zagadnień własnych ze zwykłą funkcją Riemanna P

Zreferowane wyżej pojęcia możemy teraz wykorzystać w celu uzyskania rozwiązań zagadnień własnych (2.1) w przypadku, gdy w rozwiązaniu f (2.3) występuje zwykła funkcja Riemanna P .

Wstawiając funkcję (2.3) w równanie różniczkowe (2.1) i wykorzystując związek (2.4) otrzymujemy [39]

$$\frac{d^2 P}{d\xi^2} + \frac{h-1}{h} \frac{1}{\xi} \frac{dP}{d\xi} + \frac{x^2}{h^2 \xi^2} \left[\left(\frac{1}{2\mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{dx} \right)^2 - \frac{1}{2\mathbf{p}} \frac{d^2 \mathbf{p}}{dx^2} - \frac{\mathbf{q} - \lambda \varrho}{\mathbf{p}} \right] P = 0. \quad (2.22)$$

To równanie różniczkowe musi być spełnione niezależnie od tego, czy P jest zwykłą czy jakąkolwiek konfluentną funkcją Riemanna P . W przypadku, którym się obecnie zajmujemy, funkcja $P(\xi)$ jest zwykłą funkcją Riemanna. Zatem, równanie (2.22) musi być identyczne z pierwotnym równaniem (2.5) na tę funkcję. Z przyrównania współczynników przy $\frac{dP}{d\xi}$ wynika, że

$$\alpha + \alpha' = \frac{1}{h}, \quad \beta + \beta' = -\frac{1}{h}, \quad \gamma + \gamma' = 1, \quad (2.23)$$

przy czym uwzględniono zależność (2.6). Porównajmy teraz wyrażenia przy samej funkcji P w obu równaniach (2.5) i (2.22). Mnożąc je przez $h^2 \xi^2$ i przyrównując do siebie przekonujemy się, że funkcja

$$S(\xi) = \frac{h^2 \xi}{1 - \xi} \left[\frac{\alpha \alpha'}{\xi} + \frac{\gamma \gamma'}{1 - \xi} - \beta \beta' \right]$$

zmiennej ξ zawierająca parametry funkcji Riemanna P oraz stałą h musi być równa funkcji zmiennej x

$$S(x) = x^2 \left[\left(\frac{1}{2\mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{dx} \right)^2 - \frac{1}{2\mathbf{p}} \frac{d^2 \mathbf{p}}{dx^2} - \frac{\mathbf{q} - \lambda \varrho}{\mathbf{p}} \right]. \quad (2.24)$$

Przekształcając funkcję $S(\xi)$ przez rozkład na ułamki proste możemy ją zapisać w postaci

$$S(\xi) = \frac{s_{-2}}{(1-\xi)^2} + \frac{s_{-1}}{1-\xi} + s_0, \quad (2.25)$$

gdzie

$$s_{-2} = h^2\gamma\gamma', \quad s_{-1} = h^2(\alpha\alpha' - \beta\beta' - \gamma\gamma'), \quad s_0 = h^2\beta\beta'. \quad (2.26)$$

Wykorzystując zależności (2.23) otrzymujemy

$$\alpha \left(\alpha - \frac{1}{h} \right) = -\frac{s_{-2} + s_{-1} + s_0}{h^2}, \quad \beta \left(\beta + \frac{1}{h} \right) = -\frac{s_0}{h^2}, \quad \gamma(\gamma - 1) = -\frac{s_{-2}}{h^2}, \quad (2.27)$$

czyli

$$\alpha = \frac{1}{2h} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4(s_{-2} + s_{-1} + s_0)} \right), \quad \beta = -\frac{1}{2h} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4s_0} \right),$$

$$\gamma = \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4s_{-2}}{h^2}} \right). \quad (2.28)$$

Podsumowując: Aby funkcja f (2.3) ze zwykłą funkcją Riemanna P była rozwiązaniem równania różniczkowego (2.1), funkcja $S(x)$ (2.24) utworzona ze współczynników \mathbf{p} , \mathbf{q} , ϱ tego równania musi się dać przedstawić w postaci funkcji $S(\xi)$ (2.25), przy czym pomiędzy x i ξ musi istnieć związek $\xi = \kappa x^h$. Gdy spełniony jest ten warunek możemy bezpośrednio podać wartości stałych κ , h , s_{-2} , s_{-1} i s_0 , a następnie obliczyć ze wzorów (2.28) parametry α , β , γ , które ustalają funkcję Riemanna P . Musimy jeszcze określić warunki, które należy nałożyć dodatkowo na parametry α , β , γ , aby funkcja f (2.3) była rozwiązaniem zagadnienia własnego (2.1). Obszar, w którym określone jest dane zagadnienie własne, odpowiada w zmiennej ξ obszarowi $(0, 1)$. Dla zmiennej x jest to również obszar ograniczony, przy czym x przebiega wartości należące do przedziału $(0, \pm\kappa^{-\frac{1}{h}})$ albo $(-\kappa^{-\frac{1}{h}}, \kappa^{-\frac{1}{h}})$, co wynika ze związku $\xi = \kappa x^h$. W pierwszym przypadku punkty $\xi = 0$ i $\xi = 1$ są punktami osobliwymi funkcji f . W przypadku drugim w punkcie $x = 0$, a więc też w $\xi = 0$ funkcja f musi być regularna, a na to, by miała osobliwości w punktach $x_1 = -\kappa^{-\frac{1}{h}}$ i $x_2 = \kappa^{-\frac{1}{h}}$ trzeba, by oba te punkty odpowiadały punktowi osobliwemu $\xi = 1$. Wynika stąd, że h musi być w tym przypadku liczbą całkowitą parzystą.

W obu przypadkach funkcja $f(x)$ musi spełniać warunek normowalności z wagą $\varrho(x)$ na odpowiednim odcinku, to znaczy funkcja $P(\xi)$ nie może w punktach $\xi = 0$ i $\xi = 1$ zbyt szybko dążyć do nieskończoności. W celu niedopuszczenia do zbyt prędkiego wzrastania funkcji własnych w tych punktach rozporządzamy dwiema możliwościami: odpowiednim doбором parametrów α , β i γ wynikających ze wzorów (2.28)

oraz warunkami, które otrzymujemy żądając, aby funkcja hipergeometryczna F występująca w funkcji Riemanna P była wielomianem. W związku z tym, że w wyrażeniu (2.24) na funkcję $S(x)$ występuje parametr własny λ , musi od niego zależeć przynajmniej jeden ze współczynników s_{-2} , s_{-1} , s_0 , a więc również przynajmniej jeden z parametrów α , β , γ . Jak wynika z postaci funkcji P (2.16)-(2.21), pierwsze dwa współczynniki (odpowiadające np. w funkcji $F(a, b; c; \xi)$ parametrom a i b) wchodzące w skład ich funkcji hipergeometrycznych zależą albo wprost od α , β , γ albo na mocy związków (2.23) przez parametry α' , β' , γ' . W ten sposób przyrównanie każdego z obu tych współczynników funkcji hipergeometrycznych F do ujemnej liczby całkowitej, czyli przejście do wielomianu, ustala wartość parametru własnego λ .

Interesujący jest fakt, że otrzymujemy zawsze te same funkcje i wartości własne niezależnie od postaci funkcji P , których używamy do ich obliczania [39]. Ze wszystkich funkcji P podanych przez wzory (2.16)-(2.21) praktycznie potrzebne są do rozwiązywania zagadnień własnych teorii kwantów właściwie tylko dwie, te które odpowiadają rozwinięciu wokół punktów $\xi = 0$ i $\xi = \infty$. Funkcja hipergeometryczna F zawarta w pierwszej lub drugiej funkcji P daje bowiem wielomiany uporządkowane według rosnących lub malejących potęg ξ . Którą z obu funkcji (2.16) i (2.17) lub (2.20) i (2.21) wybierzemy, jest rzeczą obojętną, gdyż każda z tych postaci przechodzi w drugą przy przemianie parametrów α i α' lub β i β' . Ponieważ jednak wielomiany pochodzące z funkcji hipergeometrycznej łatwo przeprowadzić z postaci uporządkowanej według rosnących potęg ξ do postaci uporządkowanej według malejących potęg ξ i na odwrót, możemy zasadniczo zadowolić się jedną funkcją P w dalszych obliczeniach, np. (2.16).

2.3. Rozwiązywanie zagadnień własnych z konfluentną funkcją Riemanna P

Oprócz zwykłego równania Riemanna i zwykłego równania hipergeometrycznego ważną rolę odgrywać będą konfluentne formy tych równań. Aby w tym przypadku otrzymać wzory na rozwiązanie równania różniczkowego (2.1) odpowiadające wzorom dla zwykłej funkcji Riemanna P musimy wykonać pewne przejście graniczne. Punkty $\xi = 0$, 1 i ∞ są zarówno dla zwykłej funkcji P , jak też dla zwykłej funkcji F regularnymi punktami osobliwymi. Chcąc otrzymać konfluentną postać $F_1(a; c; \zeta)$ funkcji hipergeometrycznej $F(a, b; c; \xi)$ należy najpierw wprowadzić nową zmienną $\xi = \frac{\zeta}{b}$. Wtedy funkcja $F(a, b; c; \frac{\zeta}{b})$ ma punkt osobliwy $\zeta = b$, odpowiadający punktowi osobliwemu $\xi = 1$. Jeśli wykonamy przejście graniczne $b \rightarrow \infty$, to punkt osobliwy $\zeta = b$

„zlewa” się (po łacinie *co fluere*) z punktem osobliwym w nieskończoności i dostajemy na mocy szeregu potęgowego (2.14) konfluentną postać funkcji hipergeometrycznej [39]

$$F_1(a; c; \zeta) = 1 + \frac{a}{1!c}\zeta + \frac{a(a+1)}{2!c(c+1)}\zeta^2 + \dots \quad (2.29)$$

W dalszych rozważaniach nie będą nas interesowały konfluentne postaci ogólnej funkcji Riemanna, tylko tej specjalnej funkcji P , w której parametry $\alpha, \beta, \gamma, \alpha', \beta', \gamma'$ spełniają związki (2.23). Następnie wykonujemy z funkcją P przejście graniczne $\epsilon \rightarrow 0$ przy założeniu [39]

$$\begin{aligned} \xi &= \epsilon\zeta, & \alpha &= \alpha, & \beta &= \beta_0 - \frac{1}{2\epsilon}, & \gamma &= \gamma_0 + \frac{1}{2\epsilon}, \\ \alpha' &= \alpha', & \beta' &= \beta'_0 + \frac{1}{2\epsilon}, & \gamma' &= \gamma'_0 - \frac{1}{2\epsilon}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Chcąc zapewnić spełnianie się związków (2.23) zakładamy, że

$$\alpha + \alpha' = \frac{1}{h}, \quad \beta_0 + \beta'_0 = -\frac{1}{h}, \quad \gamma_0 + \gamma'_0 = 1, \quad (2.31)$$

zaś na mocy (2.12) jest

$$a = \alpha + \beta_0 + \gamma_0, \quad b = \alpha + \beta'_0 + \gamma_0 + \frac{1}{\epsilon}, \quad c = 1 - \alpha' + \alpha. \quad (2.32)$$

Jak wynika z (2.32) współczynnik b dla $\epsilon \rightarrow 0$ dąży do nieskończoności, podczas gdy wartości współczynników a, c pozostają skończone.

Równanie (2.5) funkcji P otrzymuje po pomnożeniu przez ϵ^2 w granicy $\epsilon \rightarrow 0$ na mocy (2.31) następującą postać

$$\frac{d^2 P_1}{d\zeta^2} + \frac{1 - \alpha - \alpha'}{\zeta} \frac{dP_1}{d\zeta} + \left(\frac{\alpha\alpha'}{\zeta^2} + \frac{\beta'_0 - \beta_0 - \gamma_0 + \gamma'_0}{2\zeta} - \frac{1}{4} \right) P_1 = 0, \quad (2.33)$$

gdzie P_1 jest konfluentną funkcją Riemanna. Równanie to posiada osobliwość regularną w zerze i istotną w nieskończoności. Ostateczna postać równania (2.33) na mocy (2.31) i (2.32) jest następująca

$$\frac{d^2 P_1}{d\zeta^2} + \frac{h-1}{h} \frac{1}{\zeta} \frac{dP_1}{d\zeta} + \left[\frac{\alpha(\frac{1}{h} - \alpha)}{\zeta^2} + \frac{\alpha - a + \frac{1}{2} - \frac{1}{2h}}{\zeta} - \frac{1}{4} \right] P_1 = 0. \quad (2.34)$$

Ze względu na (2.4) i (2.30) pomiędzy zmiennymi ζ i x istnieje związek

$$\zeta = \kappa x^h. \quad (2.35)$$

Przyrównując do siebie nawiasy przy funkcji P_1 w równaniu (2.34) i przy funkcji P w równaniu (2.22), w którym zastąpiliśmy zmienną ξ przez zmienną ζ , przekonujemy się, że funkcja

$$S(\zeta) = s_0^* + s_1^* \zeta + s_2^* \zeta^2, \quad (2.36)$$

musi być równa funkcji $S(x)$ (2.24). Współczynniki funkcji $S(\zeta)$ mają postać

$$s_0^* = -h^2\alpha\left(\alpha - \frac{1}{h}\right), \quad s_1^* = h^2\left(\alpha - a + \frac{1}{2} - \frac{1}{2h}\right), \quad s_2^* = -\frac{h^2}{4}. \quad (2.37)$$

Aby rozwiązanie f równania różniczkowego (2.1) dało się wyrazić w postaci

$$f(x) = \mathbf{p}(x)^{-1/2}P_1(\zeta), \quad (2.38)$$

musi funkcja $S(x)$ (2.24) dać się wyrazić jako funkcja zmiennej ζ (2.35) przez wyrażenie (2.36), musi więc mieć następującą postać

$$S(x) = \sigma_0 + \sigma_1x^h + \sigma_2x^{2h}. \quad (2.39)$$

Gdy ten warunek jest spełniony, możemy ustalić bezpośrednio wartość stałej h , a następnie wartości stałych $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2$ korzystając ze wzorów

$$\sigma_0 = -h^2\alpha\left(\alpha - \frac{1}{h}\right), \quad \sigma_1 = \kappa h^2\left(\alpha - a + \frac{1}{2} - \frac{1}{2h}\right), \quad \sigma_2 = -\frac{\kappa^2 h^2}{4}. \quad (2.40)$$

Stąd otrzymujemy wyrażenia na parametry κ, α oraz a

$$\kappa = \frac{1}{h}\sqrt{-4\sigma_2}, \quad \alpha = \frac{1}{2h}(1 \pm \sqrt{1 - 4\sigma_0}), \quad a = \alpha - \frac{\sigma_1}{\kappa h^2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2h}. \quad (2.41)$$

Rozwiązanie równania różniczkowego (2.34) konfluentnej funkcji Riemanna P_1 otrzymujemy ze zwykłej funkcji P (2.16) po podstawieniu (2.30) i przy pomocy przejścia granicznego $\epsilon \rightarrow 0$ w postaci [39]

$$P_1 = \zeta^\alpha e^{-\zeta/2} F_1\left(a; 2\alpha + 1 - \frac{1}{h}; \zeta\right), \quad (2.42)$$

gdzie zgodnie z (2.32) $a = \alpha + \beta_0 + \gamma_0$, zaś F_1 jest konfluentną funkcją hipergeometryczną.

Jeśli podstawimy (2.30) do funkcji (2.17) i wykonamy przejście graniczne $\epsilon \rightarrow 0$, to dostaniemy rozwiązanie (2.42), w którym α zastąpione zostało przez α' .

Z obu rozwiązań zbieżnych w otoczeniu punktu $\xi = \infty$ otrzymujemy z (2.20) po podstawieniu (2.30) i przejściu granicznym $\epsilon \rightarrow 0$ funkcję

$$P_1 = \zeta^{-a+\alpha} e^{-\zeta/2} G\left(a, a - 2\alpha + \frac{1}{h}; \frac{1}{\zeta}\right), \quad (2.43)$$

gdzie

$$G(a, b; \zeta) = 1 + \frac{ab}{1!}\zeta + \frac{a(a+1)b(b+1)}{2!}\zeta^2 + \dots \quad (2.44)$$

W przypadku, gdy a lub b jest ujemną liczbą całkowitą, szereg (2.44) przechodzi w wielomian, a więc funkcja (2.43) określona jest przez wyrażenie zbieżne. Druga funkcja P (2.21) z obu rozwinięć wokół punktu w nieskończoności $\xi = \infty$ nie dąży dla $\epsilon \rightarrow 0$ do określonego wyrażenia.

Do wyznaczania funkcji własnych f możemy używać funkcji P_1 (2.42) lub (2.43) zależnie od tego, czy zamierzamy otrzymywać wielomiany uporządkowane według rosnących czy też malejących potęg ζ , odpowiednio. W dalszych rozważaniach ograniczymy się do wyłącznego używania funkcji P_1 określonej przez wzór (2.42).

Konfluentna funkcja Riemanna P_1 występująca w (2.38) ma dwa punkty osobliwe $\zeta = 0$ i $\zeta = \infty$. Fakt, że punkt $\zeta = \infty$ jest istotnym punktem osobliwym funkcji P_1 powoduje, że konfluentna funkcja hipergeometryczna F_1 występująca w (2.42) musi być wielomianem. Dzieje się to wówczas, gdy jej parametr a jest ujemną liczbą całkowitą, tzn. $a = -n$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Narzucenie warunku $a = -n$ pozwala na wyznaczenie widma własnego zagadnienia (2.1) podobnie, jak w przypadku zwykłej funkcji hipergeometrycznej. Parametr α musimy dobrać w ten sposób, aby funkcja własna zachowywała się dostatecznie regularnie w punkcie $\zeta = 0$.

Obszar, w którym określone jest zagadnienie własne może sięgać od $-\infty$ do ∞ , albo od 0 do $-\infty$, lub ∞ . W przypadku obszaru $(-\infty, \infty)$ czynnik $e^{-\zeta/2}$ we wzorze (2.42) narzuca warunek, by h było liczbą całkowitą i parzystą.

2.4. Zestawienie wzorów do rozwiązywania zagadnień własnych metodą Sommerfelda

W celu ułatwienia posługiwania się podanymi powyżej wzorami, zostaną one zebrane i uporządkowane w sposób bezpośrednio dający się wykorzystać podczas wykonywania obliczeń [39].

Równanie różniczkowe drugiego rzędu określające zagadnienie własne należy - ewentualnie mnożąc przez odpowiednią funkcję - przedstawić w postaci samosprężonej (2.1)

$$\frac{d}{dx} \left(\mathbf{p}(x) \frac{df(x)}{dx} \right) - (\mathbf{q}(x) - \lambda \varrho(x)) f(x) = 0.$$

Następnie należy podać funkcję

$$S(x) = x^2 \left[\left(\frac{\mathbf{p}'}{2\mathbf{p}} \right)^2 - \frac{\mathbf{p}''}{2\mathbf{p}} - \frac{\mathbf{q} - \lambda \varrho}{\mathbf{p}} \right]. \quad (2.45)$$

Dalszy bieg obliczeń zależy od tego, czy obszar, w którym określone jest zagadnienie własne, jest skończony, czy też nieskończony.

Aby w przypadku przedziału skończonego zagadnienie własne (2.1) dało się rozwiązać przy pomocy metody wielomianów, funkcja $S(x)$ musi mieć postać

$$S(\xi) = \frac{s_{-2}}{(1-\xi)^2} + \frac{s_{-1}}{(1-\xi)} + s_0 = \frac{s_0\xi^2 - (s_{-1} + 2s_0)\xi + (s_0 + s_{-1} + s_{-2})}{(1-\xi)^2}, \quad (2.46)$$

gdzie

$$\xi = \kappa x^h. \quad (2.47)$$

Jeśli $S(x)$ ma tę postać, należy ustalić wartości stałych κ , h , s_{-2} , s_{-1} , s_0 i wyznaczyć parametry α , β , γ korzystając ze wzorów

$$\alpha = \frac{1}{2h} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4(s_0 + s_{-1} + s_{-2})} \right), \quad \beta = -\frac{1}{2h} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4s_0} \right),$$

$$\gamma = \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4s_{-2}}{h^2}} \right). \quad (2.48)$$

Rozwiązanie równania różniczkowego (2.1) dane jest wówczas przez

$$f(x) = \mathbf{p}(x)^{-1/2} P(\xi), \quad (2.49)$$

gdzie $P(\xi)$ jest zwykłą funkcją Riemanna daną wzorem

$$P(\xi) = \xi^\alpha (1-\xi)^\gamma F \left(\alpha + \beta + \gamma, \alpha - \beta + \gamma - \frac{1}{h}; 2\alpha + 1 - \frac{1}{h}; \xi \right), \quad (2.50)$$

przy czym należy tak dobrać stałe α , β , γ , aby rozwiązanie f było dobrze określone dla $\xi = 0$ i $\xi = 1$. Następnie narzucając warunek

$$\alpha + \beta + \gamma = -n \quad (\text{albo} \quad \alpha - \beta + \gamma - \frac{1}{h} = -n), \quad (2.51)$$

wyznaczamy wartości własne parametru λ .

Aby zagadnienie własne (2.1) dało się rozwiązać w przypadku przedziału nieskończonego, funkcja $S(x)$ (2.45) musi się dać przedstawić w postaci

$$S(x) = \sigma_0 + \sigma_1 x^h + \sigma_2 x^{2h}. \quad (2.52)$$

Gdy ten warunek jest spełniony, możemy ustalić bezpośrednio wartość stałej h , a następnie wartości stałych σ_0 , σ_1 , σ_2 i wyznaczyć parametry κ , α oraz a korzystając ze wzorów

$$\kappa = \frac{1}{h} \sqrt{-4\sigma_2}, \quad \alpha = \frac{1}{2h} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4\sigma_0} \right), \quad a = \alpha - \frac{\sigma_1}{\kappa h^2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2h}. \quad (2.53)$$

Rozwiązanie równania różniczkowego (2.1) dane jest wówczas przez

$$f(x) = \mathbf{p}(x)^{-1/2} P_1(\zeta), \quad \zeta = \kappa x^h, \quad (2.54)$$

gdzie $P_1(\zeta)$ jest konfluentną funkcją Riemanna daną wzorem

$$P_1(\zeta) = \zeta^\alpha e^{\frac{-\zeta}{2}} F_1\left(a; 2\alpha + 1 - \frac{1}{h}; \zeta\right), \quad (2.55)$$

przy czym należy tak dobrać α , aby $f(x)$ było dobrze określone w punkcie $x = 0$. Następnie narzucając warunek $a = -n$ wyznaczamy wartości własne parametru λ .

Bąk sferyczny z dylatacjami

Przedmiotem rozważań tego rozdziału jest próba klasycznego i kwantowego opisu zagadnienia bąka sferycznego z dylatacjami w izotropowym polu sił. Najpierw zajmiemy się problemem bąka sferycznego poddanego oddziaływaniom zewnętrznym opisywanym przy pomocy potencjałów Bertranda [29], [30], [47].

3.1. Ciało sztywne - parametryzacja problemu. Wielkości kinematyczne i dynamiczne

Więzy metrycznej sztywności nałożone na ruch afiniczny oznaczają, że oprócz relacji afinicznych zachowują się też wszystkie relacje metryczne między punktami materialnymi, a więc wszystkie odległości, a tym samym i kąty. Przestrzeń konfiguracyjna Q ciała sztywnego, bez translacyjnych stopni swobody, jest izomorficzna z $SO(3, \mathbb{R})$ i ma trzy wymiary. Zamiast więc mówić o macierzy deformacji Φ , będziemy mówili o macierzy obrotu $R(t) \in SO(3, \mathbb{R})$, która spełnia warunek ortogonalności $R^T R = \mathbb{1}$, stąd $R^T = R^{-1}$.

W przestrzeni konfiguracyjnej Q działają dwie naturalne grupy transformacji $SO(3, \mathbb{R})$ w siebie: lewe i prawe regularne translacje

$$R \mapsto AR, \quad R \mapsto RA, \tag{3.1}$$

gdzie $R, \mathcal{A} \in SO(3, \mathbb{R})$. Grupy przekształceń lewostronnych i prawostronnych są tranzytywne. Lewe translacje opisują obroty ciała sztywnego w przestrzeni fizycznej, zaś prawe - obroty w przestrzeni materialnej, tzn. obroty konfiguracji odniesienia. Grupy te przecinają się trywialnie, tzn. nie posiadają wspólnych elementów poza transformacją identyczności. Natomiast grupa automorfizmów wewnętrznych

$$R \mapsto \mathcal{A}R\mathcal{A}^{-1}, \quad \mathcal{A} \in SO(3, \mathbb{R}), \quad (3.2)$$

jest grupą nietranzytywną.

Wygodnie będzie wprowadzić wielkości nieholonomiczne (quasiprędkości), czyli prędkości kątowe. Macierz prędkości kątowej ω związanej z układem laboratoryjnym można wyrazić za pomocą macierzy obrotu R w następujący sposób

$$\omega = \frac{dR}{dt}R^T = -\omega^T, \quad \omega = \begin{pmatrix} 0 & \omega^3 & -\omega^2 \\ -\omega^3 & 0 & \omega^1 \\ \omega^2 & -\omega^1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Natomiast macierz prędkości kątowej $\hat{\omega}$ związanej z układem współtowarzyszącym ma postać

$$\hat{\omega} = R^T \frac{dR}{dt} = -\hat{\omega}^T, \quad \hat{\omega} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\omega}^3 & -\hat{\omega}^2 \\ -\hat{\omega}^3 & 0 & \hat{\omega}^1 \\ \hat{\omega}^2 & -\hat{\omega}^1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Zachodzi między nimi związek

$$\omega = R\hat{\omega}R^T.$$

Podobnie, jak w przypadku ciała deformowalnego jednorodnie energia kinetyczna ciała sztywnego wyraża się wzorem (1.8), co przy uwzględnieniu (3.4) prowadzi do wyrażenia

$$T = -\frac{1}{2}\text{Tr}(J\hat{\omega}^2). \quad (3.5)$$

Pamiętając, że $I = \text{Tr}J\hat{\mathbb{I}} - J$ (1.10) dostajemy energię kinetyczną w postaci

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 I^i (\hat{\omega}^i)^2, \quad (3.6)$$

gdzie I^i są to główne momenty bezwładności ciała.

Moment pędu (spin) S ciała związany z układem laboratoryjnym wyraża się wzorem (1.13), tzn.

$$S = RJ \frac{dR^T}{dt} - \frac{dR}{dt} JR^T = R(J\hat{\omega} - \hat{\omega}J)R^T. \quad (3.7)$$

Natomiast spin współtowarzyszący \hat{S} przyjmuje postać

$$\hat{S} = R^T S R = -(J\hat{\omega} - \hat{\omega}J). \quad (3.8)$$

Wielkość

$$\vec{D} = \vec{S} - \hat{S} \quad (3.9)$$

nazywamy hiperspinem. Wielkości S^i są składowymi momentu pędu w układzie laboratoryjnym, zaś \hat{S}^i są składowymi momentu pędu w układzie współtowarzyszącym.

Położenie ciała sztywnego unieruchomionego w jednym punkcie można opisywać za pomocą kątów Eulera. Analizując zagadnienia dotyczące bąka kulistego wygodniej jest przyjąć za współrzędne uogólnione składowe wektora obrotu \vec{k} , które są współrzędnymi kanonicznymi pierwszego rodzaju na grupie obrotów. Kierunek wektora obrotu, tzn. $\vec{n} = \frac{\vec{k}}{k}$, oznacza orientację osi obrotu (reguła śruby prawoskrętnej), natomiast długość k równa się kątowi obrotu. Obroty o kąt π wokół \vec{n} i $-\vec{n}$ są nierozróżnialne, tzn. $R(\pi\vec{n}) = R(-\pi\vec{n})$.

Ponieważ wyrażenie macierzy $R(\vec{k})$ poprzez składowe wektora obrotu jest skomplikowane, rozważmy działanie tej macierzy na wektor \vec{x} , czyli

$$R(\vec{k})\vec{x} = \cos k\vec{x} + k^{-2}(1 - \cos k)(\vec{k}\vec{x})\vec{k} + k^{-1} \sin k\vec{k} \times \vec{x}, \quad (3.10)$$

gdzie $k = |\vec{k}| = \sqrt{\vec{k}\vec{k}}$, przy czym $0 \leq k \leq \pi$. Dla małych obrotów $k \approx 0$ mamy

$$R(\vec{k})\vec{x} \approx \vec{x} + \vec{k} \times \vec{x}. \quad (3.11)$$

Charakter \vec{k} jako współrzędnych kanonicznych pierwszego rodzaju jest wyrażony równaniami

$$R(\vec{k}) = \exp(k^i \Lambda_i) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (k^i \Lambda_i)^n, \quad (\text{konwencja sumacyjna}) \quad (3.12)$$

gdzie Λ_i - macierze o składowych $(\Lambda_i)_{jk} = -\epsilon_{ijk}$, ϵ jest antysymetryczne i $\epsilon_{123} = 1$. Macierze te podlegają standardowym regułom komutacyjnym dla grupy obrotów $SO(3, \mathbb{R})$: $[\Lambda_i, \Lambda_j] = \epsilon_{ijk} \Lambda_k$.

Rozmaitość $SO(3, \mathbb{R})$ w przestrzeni \vec{k} jest kulą o promieniu π , przy czym antypodalne punkty sfery $k = \pi$ utożsamiają się ze sobą. Rozmaitość ta jest więc dwuspójna. Jedoparametrowe podgrupy i ich klasy równoważności otrzymane przez działanie lewych i prawych translacji regularnych jako lewe i prawe warstwy są krzywymi nieściągalskimi do punktu. W wyniku działania automorfizmu wewnętrznego $\mathcal{A}R(\vec{k})\mathcal{A}^{-1} = R(\mathcal{A}\vec{k}) = \mathcal{A}R(\vec{k})\mathcal{A}^T$ ulega obrotowi tylko wektor obrotu \vec{k} , natomiast jego długość (kąt obrotu) pozostaje bez zmian.

Grupa $SU(2)$ jest grupą nakrywającą dla $SO(3, \mathbb{R})$. Jest to grupa unitarnych i unimodularnych macierzy zespolonych 2×2 , takich że dla każdego $u \in SU(2)$ spełnione jest:

$$u^+u = \mathbb{1}, \quad \det u = 1, \quad \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

gdzie u^+ jest macierzą hermitowsko sprzężoną do u . Grupa ta również może być parametryzowana za pomocą wektora obrotu. Macierz u wyrażona za pomocą \vec{k} przedstawia się następująco

$$u(\vec{k}) = \exp(k^j \frac{\sigma_j}{2i}) = \cos \frac{k}{2} \mathbb{1} - ik^j \sigma_j \frac{1}{k} \sin \frac{k}{2}, \quad (3.13)$$

gdzie σ_j są macierzami Pauliego, a $k: 0 \leq k \leq 2\pi$,

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Macierze $a_j := \frac{\sigma_j}{2i}$ podlegają standardowym regułom komutacyjnym: $[a_i, a_j] = \epsilon_{ijk} a_k$.

Rozmaitość $SU(2)$ w przestrzeni \vec{k} jest kulą o promieniu 2π , przy czym cała sfera $k = 2\pi$ utożsamia się z punktem $-\mathbb{1}$. Jest to rozmaitość jednospójna. Jednoparametrowe podgrupy są prostymi przechodzącymi przez środek kuli o promieniu $k = 2\pi$, są więc jej osiami. Dwa punkty na każdej z takich prostych znajdujące się we wzajemnej odległości równej 2π odpowiadają tej samej macierzy $R \in SO(3, \mathbb{R})$. Jądrem homomorfizmu $SU(2) \mapsto SO(3, \mathbb{R})$ jest zbiór $\{\mathbb{1}, -\mathbb{1}\}$. Zatem, każdej macierzy $R \in SO(3, \mathbb{R})$ odpowiadają dwie różniące się znakiem macierze $u, -u \in SU(2)$. Te podgrupy jednoparametrowe, podobnie jak ich warstwy otrzymane przez działanie lewych i prawych translacji regularnych są oczywiście krzywymi zamkniętymi i to topologicznie trywialnymi, ściągającymi do punktu. W tym przejawia się jednospójność grupy $SU(2)$.

3.2. Formalizm kanoniczny

Wprowadzone powyżej prędkości kątowe nie są prędkościami uogólnionymi. Jednak możemy za ich pomocą wykonać przekształcenie Legendre'a, w wyniku którego dostaniemy wielkości kanoniczne do nich sprzężone, tzw. spiny kanoniczne

$$\Upsilon_i = \frac{\partial L}{\partial \omega^i}, \quad \Pi_i = \frac{\partial L}{\partial \hat{\omega}^i}, \quad (3.14)$$

gdzie $L = T - V$, a Υ_i i Π_i są składowymi kanonicznego momentu pędu w układzie laboratoryjnym i współtowarzyszącym, odpowiednio. Kanoniczny hiperspin przyjmuje postać

$$\vec{M} = \vec{\Upsilon} - \vec{\Pi} \equiv \vec{S} - \hat{S} = \vec{D}, \quad (3.15)$$

gdzie $\vec{\Upsilon} = \vec{S}$, $\vec{\Pi} = \hat{S}$ w przypadku sił potencjalnych. Składowe Υ_i , Π_i , M_i spełniają nawiasy Poissona

$$\{\Upsilon_i, \Upsilon_j\} = \epsilon_{ijk} \Upsilon_k, \quad \{\Pi_i, \Pi_j\} = -\epsilon_{ijk} \Pi_k, \quad \{\Upsilon_i, \Pi_j\} = 0, \quad \{M_i, M_j\} = \epsilon_{ijk} M_k. \quad (3.16)$$

Wielkości $\vec{\Upsilon}$, $\vec{\Pi}$ interpretuje się jako generatory hamiltonowskie, odpowiednio, przestrzennych i materialnych obrotów. Jak wspomniano wcześniej, transformacje pierwszego rodzaju mogą być interpretowane jako obroty bryły sztywnej w przestrzeni fizycznej, zaś transformacje drugiego rodzaju opisują obroty konfiguracji odniesienia. Kanoniczny hiperspin \vec{M} generuje wewnętrzny automorfizm, tzn. hiperobroty, czyli obroty wektora obrotu.

Wielkość $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{k}^i}$ jest pędem kanonicznym sprzężonym do k^i , gdzie $\dot{k}^i = \frac{dk^i}{dt}$ jest prędkością uogólnioną. Hiperspin w tych zmiennych ma postać

$$\vec{M} = \vec{k} \times \vec{p} = \vec{D}. \quad (3.17)$$

Jak widać, wzór ten jest analogiczny do wyrażenia dla momentu pędu punktu materialnego we współrzędnych kartezjańskich.

3.3. Bąk sferyczny. Zmienne hamiltonowskie

Problem ruchu ciała sztywnego w zewnętrznym polu sił nastęrcza poważne kłopoty zarówno przy opisie klasycznym i kwantowym. Jednak zagadnienie to daje się rozwiązać analitycznie w przypadku izotropowym. Izotropowość problemu prowadzi do zagadnień o wysokim stopniu symetrii, co ułatwia ich rozwiązanie. Izotropowy jest rozkład masy w ciele, tzn. tensor bezwładności jest kulisty, ma trzy jednakowe główne momenty bezwładności (wartości własne). Izotropowe są również siły działające na ciało, a więc także energia potencjalna, która jest niezmiennicza względem hiperobrotów. Energia kinetyczna bąka sferycznego jest niezmiennicza zarówno względem lewych i prawych translacji (3.1) oraz względem automorfizmów wewnętrznych, co prowadzi do uproszczenia problemu. Otóż, indukowany przez formę energii kinetycznej kinematyczny tensor metryczny G jest także niezmienniczny względem lewych i prawych translacji, czyli przestrzennych i materialnych obrotów, odpowiednio. Skutkiem czego miara

określona na grupie $SO(3, \mathbb{R})$ (oraz na grupie nakrywającej $SU(2)$) jest jednocześnie miarą Haara (miarą niezmienniczą) oraz naturalną miarą w przestrzeni Riemanna o tensorze metrycznym G (1.40).

Dla bąka kulistego $I^1 = I^2 = I^3 = \mu$ energia kinetyczna (3.6) po wyrażeniu ω^i przez \dot{k}^i przyjmuje postać

$$T = \frac{\mu}{2} G_{ij} \frac{dk^i}{dt} \frac{dk^j}{dt}. \quad (3.18)$$

Tensor G (tensor Killinga na grupie obrotów $SO(3, \mathbb{R})$) wyrażony za pomocą współrzędnych kanonicznych dany jest wzorem

$$G_{ij} = 4k^{-2} \sin^2 \frac{k}{2} \delta_{ij} + k^{-2} \left(1 - 4k^{-2} \sin^2 \frac{k}{2} \right) k^i k^j. \quad (3.19)$$

Ponieważ rozpatrujemy model izotropowy wygodnie będzie wprowadzić zmienne sferyczne (k, ϑ, ϕ) w przestrzeni \vec{k}

$$\begin{aligned} k^1 &= k \sin \vartheta \cos \phi, \\ k^2 &= k \sin \vartheta \sin \phi, \\ k^3 &= k \cos \vartheta, \end{aligned} \quad (3.20)$$

gdzie $0 \leq k \leq \pi$ dla $SO(3, \mathbb{R})$ ($0 \leq k \leq 2\pi$ dla $SU(2)$), $0 \leq \vartheta \leq \pi$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$.

Twierdzenie Stäckela [26] pozwala na podanie wzoru na ogólną postać potencjału, dla którego odpowiednie równanie Hamiltona-Jacobiego jak i równanie Schrödingera będą separowalne. Można sprawdzić, że rozpatrywane przez nas zagadnienie jest separowalne, jeśli potencjał ma postać

$$V = V(k) + \tilde{A}(\vartheta) \sin^{-2} \frac{k}{2} + \tilde{B}(\phi) \sin^{-2} \frac{k}{2} \sin^{-2} \vartheta. \quad (3.21)$$

Rozpatrujemy tylko modele izotropowe, czyli takie dla których $V = V(k)$ ($k = |\vec{k}|$), tzn. $\tilde{A}(\vartheta) = 0$, $\tilde{B}(\phi) = 0$.

Energia kinetyczna w zmiennych (k, ϑ, ϕ) wyraża się wzorem

$$T = \frac{\mu}{2} \left(\left(\frac{dk}{dt} \right)^2 + 4 \sin^2 \frac{k}{2} \left(\frac{d\vartheta}{dt} \right)^2 + 4 \sin^2 \frac{k}{2} \sin^2 \vartheta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right). \quad (3.22)$$

Po wykonaniu przekształcenia Legendre'a możemy Hamiltonian napisać w postaci

$$H = \frac{1}{2\mu} \left(p_k^2 + \frac{1}{4} \sin^{-2} \frac{k}{2} p_\vartheta^2 + \frac{1}{4} \sin^{-2} \frac{k}{2} \sin^{-2} \vartheta p_\phi^2 \right) + V(k), \quad (3.23)$$

gdzie p_k, p_ϑ, p_ϕ są pędami kanonicznie sprzężonymi do k, ϑ, ϕ .

Generator hamiltonowski $\vec{M} = \vec{k} \times \vec{p}$ jest stałą ruchu

$$\{M_i, H\} = 0,$$

w szczególności stały jest jego kierunek, zatem ruch wektora \vec{k} jest płaski. Tak więc, kiedy analizujemy izotropowe drgania torsyjne możemy korzystać z efektywnych technik matematycznych, wypracowanych w mechanice punktu materialnego.

Oczywiście układ jest całkowalny w tym sensie, że istnieją tam trzy (tzn. tyle ile stopni swobody) niezależne stałe ruchu z parami znikającymi nawiasami Poissona

$$H = \frac{\mu}{2} \left(\frac{dk}{dt} \right)^2 + \frac{1}{8\mu} M^2 \sin^{-2} \frac{k}{2} + V(k),$$

$$M^2 = \vec{M} \cdot \vec{M} = 16\mu^2 \sin^4 \frac{k}{2} \left(\left(\frac{d\vartheta}{dt} \right)^2 + \sin^2 \vartheta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right) = p_\vartheta^2 + \sin^{-2} \vartheta p_\phi^2, \quad (3.24)$$

$$M_3 = 4\mu \sin^2 \frac{k}{2} \sin^2 \vartheta \frac{d\phi}{dt} = p_\phi.$$

Natomiast generatory hamiltonowskie $\vec{\Upsilon}$, $\vec{\Pi}$ wyrażają się wzorami

$$\vec{\Upsilon} = \frac{1}{k} p_k \vec{k} - \frac{1}{2k} \operatorname{ctg} \frac{k}{2} \vec{k} \times \vec{M} + \frac{1}{2} \vec{M},$$

$$\vec{\Pi} = \frac{1}{k} p_k \vec{k} - \frac{1}{2k} \operatorname{ctg} \frac{k}{2} \vec{k} \times \vec{M} - \frac{1}{2} \vec{M}. \quad (3.25)$$

3.4. Stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego. Zmienne działania. Warunki Bohra-Sommerfelda

Stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego dla bąka sferycznego we współrzędnych (k, ϑ, ϕ) przyjmuje postać

$$\left(\frac{\partial S}{\partial k} \right)^2 + \frac{1}{4} \sin^{-2} \frac{k}{2} \left(\frac{\partial S}{\partial \vartheta} \right)^2 + \frac{1}{4} \sin^{-2} \frac{k}{2} \sin^{-2} \vartheta \left(\frac{\partial S}{\partial \phi} \right)^2 = 2\mu(E - V_k(k)), \quad (3.26)$$

gdzie E jest ustaloną wartością energii. Rozwiązania z separacją zmiennych k, ϑ, ϕ (ϕ jest zmienną cykliczną)

$$S = S_k(k) + S_\vartheta(\vartheta) + \alpha_\phi \phi$$

są scharakteryzowane przez trzy stałe separacji α_ϕ , α_ϑ i E , gdzie

$$p_\phi = \frac{dS_\phi}{d\phi} = \alpha_\phi, \quad p_\vartheta = \frac{dS_\vartheta}{d\vartheta} = \pm \sqrt{\alpha_\vartheta^2 - \frac{\alpha_\phi^2}{\sin^2 \vartheta}},$$

$$p_k = \frac{dS_k}{dk} = \pm \sqrt{2\mu(E - V_k(k)) - \frac{\alpha_\vartheta^2}{4} \sin^{-2} \frac{k}{2}}. \quad (3.27)$$

Możemy zauważyć analogię z punktem materialnym poruszającym się w polu siły centralnej. Zamiast orbitalnego momentu pędu mamy, tzw. hiperspin \vec{M} generujący hiperobrot. Zgodnie z analogią do problemów siły centralnej zmienne działania przyjmują następującą postać [7]

$$J_\phi = \oint p_\phi d\phi = \int_0^{2\pi} \alpha_\phi d\phi = 2\pi\alpha_\phi, \quad J_\vartheta = \oint p_\vartheta d\vartheta = 2\pi(\alpha_\vartheta - \alpha_\phi), \quad (3.28)$$

$$J_k = p_k dk = \pm \oint \sqrt{2\mu(E - V_k(k)) - \frac{(J_\vartheta + J_\phi)^2}{16\pi^2} \sin^{-2} \frac{k}{2}} dk, \quad (3.29)$$

gdzie $\alpha_\vartheta = \frac{(J_\vartheta + J_\phi)}{2\pi}$, zaś znak \pm odpowiada dwu przeciwnym kierunkom ruchu między punktami zawracania.

Podstawiając szczególną postać potencjału $V_k(k)$ we wzorze (3.29) możemy w sposób jawny wyznaczyć $J_k = J_k(E, J_\vartheta, J_\phi)$, a następnie rozwiązując to wyrażenie względem E znaleźć zależność energii od zmiennych działania $E = H(J_k, J_\vartheta, J_\phi)$.

Zależność E od $J_\vartheta + J_\phi$ odzwierciedla fakt, że dla dowolnych $V_k(k)$ układ jest co najmniej jednokrotnie zdegenerowany, $\nu^\vartheta - \nu^\phi = 0$, gdzie podstawowe częstości są dane przez

$$\nu^i = \frac{\partial E}{\partial J_i}, \quad i = k, \vartheta, \phi. \quad (3.30)$$

Przedstawimy dwa modele Bertranda (wraz z kwantowaniem quasiklasycznym opartym na warunkach Bohra-Sommerfelda), tj. zdegenerowany oscylator torsyjny $V_k(k) = 2\chi \operatorname{tg}^2 \frac{k}{2}$, $\chi > 0$ (dla $Q = SO(3, \mathbb{R})$) oraz „problem Coulomba” $V_k(k) = -\frac{\alpha}{2} \operatorname{ctg} \frac{k}{2}$, $\alpha > 0$.

3.4.1. Zdegenerowany oscylator torsyjny

Dla potencjału zdegenerowanego oscylatora torsyjnego

$$V_k(k) = 2\chi \operatorname{tg}^2 \frac{k}{2} \quad (3.31)$$

wyrażenie (3.29) przy użyciu podstawienia $z = \operatorname{tg}^2 \frac{k}{2} \in (0, \infty)$ przyjmuje postać

$$J_k = \oint \pm \sqrt{-4\mu\chi z^2 + \left(2\mu E - \frac{(J_\vartheta + J_\phi)^2}{16\pi^2}\right) z - \frac{(J_\vartheta + J_\phi)^2}{16\pi^2} \frac{dz}{z(1+z)}}.$$

Wyrażenie podcałkowe jest funkcją wymierną zmiennej z i pierwiastka kwadratowego od pewnego trójmianu kwadratowego tej zmiennej. Posłużymy się całkowaniem po odpowiednim konturze w płaszczyźnie zespolonej zmiennej z . Przedłużenie analityczne wyrażen podcałkowych na płaszczyznę zespoloną ma następujące osobliwości:

- dwa punkty rozgałęzienia na osi rzeczywistej położone w klasycznych punktach zawracania (miejscach zerowych trójmianu stojącego w całce pod znakiem pierwiastka),
- trzy bieguny 1-go rzędu: $z = -1$, $z = 0$, $z = \infty$.

Oczywiście wyrażenie podcałkowe jest jednoznaczłą funkcją w obszarze otrzymanym z płaszczyzny zespolonej \mathbb{C} przez usunięcie cięcia łączącego punkty zawracania. Jasne jest, że wyrażenie dla zmiennej działania J_k jest tożsame z całką zespoloną wykonaną po konturze nieskończenie otaczającym wspomniane cięcie. Kontur jest obiegany w zwykłym kierunku, a więc przeciwnie do wskazówek zegara. Zatem,

$$J_k = -2\pi i \operatorname{res}_{-1} - 2\pi i \operatorname{res}_0 - 2\pi i \operatorname{res}_\infty, \quad (3.32)$$

gdzie symbol residuum dotyczy pełnego wyrażenia podcałkowego.

Używamy następującej konwencji znaków $\sqrt{-1}$: $+i$ na prawo od punktów zawracania, zaś $-i$ na lewo od nich. W tym paragrafie jak i w późniejszych rachunkach będziemy posługiwać się wzorami (1.38) i $\operatorname{res}_{z=\infty} f(z) = -\operatorname{res}_{w=0} \left(\frac{1}{w^2} f\left(\frac{1}{w}\right) \right)$ (zamiast z w argumencie funkcji f podstawiamy $\frac{1}{w}$) w celu podania rozwiązania problemu. Po szeregu obliczeń otrzymujemy:

$$\operatorname{res}_{-1} = i\sqrt{4\mu\chi + 2\mu E}, \quad \operatorname{res}_0 = -i\frac{(J_\vartheta + J_\phi)}{4\pi}, \quad \operatorname{res}_\infty = -2i\sqrt{\mu\chi}.$$

Zatem

$$J_k = -\frac{(J_\vartheta + J_\phi)}{2} + 2\pi\sqrt{4\mu\chi + 2\mu E} - 4\pi\sqrt{\mu\chi}. \quad (3.33)$$

Rozwiązując (3.33) względem E dostajemy zależność energii od zmiennych działania J_k, J_ϑ, J_ϕ w postaci

$$E = \frac{J^2}{32\mu\pi^2} + \frac{\omega}{2\pi}J, \quad \omega = \sqrt{\frac{\chi}{\mu}}, \quad (3.34)$$

gdzie $J = 2J_k + J_\vartheta + J_\phi$. Mamy do czynienia z całkowitą degeneracją układu, ponieważ E zależy od J za pośrednictwem wymiernej kombinacji, tzn. $J = 2J_k + J_\vartheta + J_\phi$, stąd $\nu^k = 2\nu^\vartheta = 2\nu^\phi = \nu$. Podstawowa częstość drgań wynosi $\nu = \frac{\partial E}{\partial J} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\omega^2 + \frac{E}{2\mu}}$.

Przeprowadzając kwantyzację w sensie warunków Bohra-Sommerfelda, tzn. $J = nh$, gdzie h jest stałą Plancka i $n = 0, 1, \dots$, otrzymujemy następujące widmo energii:

$$E = \frac{n^2\hbar^2}{8\mu} + n\hbar\omega = \frac{j^2\hbar^2}{2\mu} + (2j)\hbar\omega, \quad (3.35)$$

gdzie $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$

Klasyczna funkcja $E(J)$ i odpowiadające jej quasiklasyczne poziomy energetyczne są superpozycjami odpowiednich wyrażeń: dla „spinorowego” bąka swobodnego i dla

oscylatora harmonicznego. Z grubsza mówiąc, ruch wywołany przez potencjał (3.31) jest superpozycją dwóch składowych: swobodnych, spinorowych obrotów (z grupą $SU(2)$ jako przestrzenią konfiguracyjną) i drgań harmonicznycch ($\frac{\chi}{2}k^2$) w algebrze Liego. Przejście graniczne $\chi \rightarrow 0$ daje nam spinorowe poziomy (pół-całkowity spin) pomimo faktu, że z powodu osobliwości potencjału w $k = \pi$ właściwą przestrzenią konfiguracyjną jest zawsze $SO(3, \mathbb{R})$, nie zaś $SU(2)$. Pomimo istotnego użycia nie-spinorowej przestrzeni konfiguracyjnej $SO(3, \mathbb{R})$, dostajemy pół-całkowite wartości j , ponieważ osobliwość (3.31) w $k = \pi$ wywołuje odbicie sprzężyste. Wskutek tego zakres skalarne go kąta k zostaje podwojony tak, jakby zastąpić $SO(3, \mathbb{R})$ przez jej nakrywającą grupę $SU(2)$. Potencjał $V_k(k) = 2\chi \operatorname{tg}^2 \frac{k}{2}$ w $SO(3, \mathbb{R})$ dostarcza nam czegoś w rodzaju klasycznego modelu dla pół-całkowitego spinu.

3.4.2. Problem Coulomba

W przypadku „problemu Coulomba”

$$V_k(k) = -\frac{\alpha}{2} \operatorname{ctg} \frac{k}{2}, \quad (3.36)$$

zależność energii E od zmiennych działania J_k, J_ϑ, J_ϕ wyraża się wzorem

$$E = \frac{J^2}{32\mu\pi^2} - \frac{2\pi^2\mu\alpha^2}{J^2}, \quad (3.37)$$

gdzie $J = J_k + J_\vartheta + J_\phi$. Układ jest całkowicie zdegenerowany, gdyż energia E zależy od wymiernej kombinacji zmiennych działania, tzn. $J = J_k + J_\vartheta + J_\phi$ ($\nu^k = \nu^\vartheta = \nu^\phi$). Wyrażenie $E(J)$ jest znowu superpozycją dwóch członów: „spinorowego” bąka swobodnego i zagadnienia Coulomba w płaskiej przestrzeni (z potencjałem $-\frac{\alpha}{r}$).

Widmo Bohra-Sommerfelda ma postać

$$E = \frac{n^2\hbar^2}{8\mu} - \frac{\mu\alpha^2}{2n^2\hbar^2} = \frac{j^2\hbar^2}{2\mu} - \frac{\mu\alpha^2}{8j^2\hbar^2}, \quad (3.38)$$

gdzie $n = 1, 2, \dots$, $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

Pierwszy wyraz we wzorze (3.38) ma tę samą postać co poprawka anharmoniczna w problemie oscylatora, a drugi wyraz jak w zwykłym zagadnieniu Keplera. Zauważmy pewną ewidentnie niefizyczną cechę tej quasiklasycznej reguły. W przypadku, gdy $\alpha \rightarrow 0$ to nie odtworzymy stanu podstawowego bąka swobodnego $E = 0$.

3.4.3. Podsumowanie

W klasie zagadnień izotropowych, tzn. dla potencjałów zależnych tylko od $k = |\vec{k}|$ (czyli od kąta obrotu, ale nie od jego osi) omówione powyżej dwa modele są jedynymi

cechującymi się na poziomie klasycznym całkowitą degeneracją (wszystkie orbity dla tych potencjałów są zamknięte). Tak więc modele te odgrywają w dynamice bąka tę samą rolę co klasyczne modele Bertranda: izotropowy oscylator harmoniczny i przyciągający „problem Keplera” w mechanice punktu materialnego.

3.5. Stacjonarne równanie Schrödingera

Używana będzie przestrzeń Hilberta $L^2(Q, \tilde{\mu})$ z miarą określoną przez metrykę. Jest ona identyczna z miarą Haara na grupie. Iloczyn skalarny zdefiniowany jest zgodnie ze wzorem (1.41) w postaci

$$\langle \Psi_1(k, \vartheta, \phi) | \Psi_2(k, \vartheta, \phi) \rangle = \int \Psi_1^*(k, \vartheta, \phi) \Psi_2(k, \vartheta, \phi) 4 \sin^2 \frac{k}{2} \sin \vartheta dk d\vartheta d\phi.$$

Operator hiperspinu $\hat{M}_i = \hat{\Upsilon}_i - \hat{\Pi}_i$ przyjmuje postać

$$\hat{M}_i = \frac{\hbar}{i} \epsilon_{ijm} k^j \frac{\partial}{\partial k^m},$$

gdzie wielkości $\hat{\Upsilon}_i$ i $\hat{\Pi}_i$ są operatorami laboratoryjnych i współtowarzyszących składowych momentu pędu, czyli odpowiednio, generatorami przestrzennych i materialnych obrotów. Operatory te określone są wzorami

$$\begin{aligned} \hat{\Upsilon}_i &= \frac{\hbar}{i} \frac{k^i}{k} \frac{\partial}{\partial k} - \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \frac{k}{2} \epsilon_{ijm} \frac{k^j}{k} \hat{M}_m + \frac{1}{2} \hat{M}_i, \\ \hat{\Pi}_i &= \frac{\hbar}{i} \frac{k^i}{k} \frac{\partial}{\partial k} - \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \frac{k}{2} \epsilon_{ijm} \frac{k^j}{k} \hat{M}_m - \frac{1}{2} \hat{M}_i, \end{aligned} \quad (3.39)$$

i spełniają następujące reguły komutacyjne

$$\left[\hat{\Upsilon}_i, \hat{\Upsilon}_j \right] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{\Upsilon}_k, \quad \left[\hat{\Pi}_i, \hat{\Pi}_j \right] = -i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{\Pi}_k, \quad \left[\hat{\Upsilon}_i, \hat{\Pi}_j \right] = 0. \quad (3.40)$$

Operator Hamiltona \hat{H} ma postać

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V_k(k), \quad (3.41)$$

gdzie Δ jest operatorem Laplace’a-Beltramiego, który w działaniu na funkcję falową wyraża się wzorem

$$\Delta \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial k^2} + \operatorname{ctg} \frac{k}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial k} + \frac{1}{4} \sin^{-2} \frac{k}{2} \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} \right).$$

Mamy następujący układ zgodnych obserwabli: \hat{H} , \hat{M}_3 i \hat{M}^2 , gdzie

$$\hat{M}^2 = \sum_{i=1}^3 \hat{M}_i \hat{M}_i.$$

Tak więc, stacjonarne równanie Schrödingera

$$\hat{H}\Psi(k, \vartheta, \phi) = E\Psi(k, \vartheta, \phi), \quad (3.42)$$

z izotropowym potencjałem $V_k(k)$ sprowadza się do jednowymiarowego równania przez podstawienie

$$\Psi_{E,l,m}(k, \vartheta, \phi) = f_{E,l}(k)Y_{lm}(\vartheta, \phi), \quad (3.43)$$

gdzie $\hbar^2 l(l+1)$, $\hbar m$ są wartościami własnymi operatorów \hat{M}^2 i \hat{M}_3 , odpowiednio, zaś Y_{lm} są harmonikami sferycznymi i radialna funkcja $f(k)$ spełnia poniższe równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2 f(k)}{dk^2} + \operatorname{ctg} \frac{k}{2} \frac{df(k)}{dk} \right] + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{8\mu} \sin^{-2} \frac{k}{2} f(k) + V_k(k)f(k) = Ef(k). \quad (3.44)$$

Równanie to da się rozwiązać dopiero wtedy, gdy zadana zostanie jawnie postać potencjału $V_k(k)$. Można spodziewać się prostych rozwiązań wyrażających się analitycznie przez znane funkcje specjalne tylko w tych przypadkach, gdy potencjał będzie posiadał jakieś szczególne własności geometryczne, np. związane z degeneracją odpowiedniego problemu klasycznego lub z występowaniem ukrytych symetrii. Poniżej przedstawione zostaną dwa modele Bertranda: zdegenerowany oscylator torsyjny oraz „problem Coulomba”.

3.5.1. Zdegenerowany oscylator torsyjny

Podstawienie $f(k) = \frac{X}{\sin \frac{k}{2}}$ we wzorze (3.44) prowadzi do równania różniczkowego na X w postaci

$$\frac{d^2 X}{dk^2} - \frac{l(l+1)}{4} \sin^{-2} \frac{k}{2} X - \frac{2\mu V_k(k)}{\hbar^2} X + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{\hbar^2}{8\mu} \right) X = 0.$$

Otrzymaliśmy równanie różniczkowe drugiego rzędu określające zagadnienie własne. Chcąc doprowadzić je do postaci samosprężonej (2.1) wprowadzamy nową zmienną $x = \sin \frac{k}{2}$. Po szeregu przekształceń otrzymujemy postać samosprężoną potrzebną do zbadania przydatności metody Sommerfelda

$$\frac{d}{dx} \left(\sqrt{1-x^2} \frac{dX}{dx} \right) - \left(\frac{l(l+1)}{x^2 \sqrt{1-x^2}} + \frac{8\mu V_k(k)}{\hbar^2 \sqrt{1-x^2}} - \frac{8\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{\hbar^2}{8\mu} \right) \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \right) X = 0. \quad (3.45)$$

Funkcja (2.45) przyjmuje postać

$$S(x) = \frac{x^4 + 2x^2 - 4l(l+1)(1-x^2) - 32x^2(1-x^2)\mu V_k(k)/\hbar^2 + 4\lambda x^2(1-x^2)}{4(1-x^2)^2}, \quad (3.46)$$

gdzie $\lambda = \frac{8\mu E}{\hbar^2} + 1$. Podstawiając jawną postać potencjału (3.31) $V_k(k) = 2\chi \operatorname{tg}^2 \frac{k}{2} = 2\chi \frac{x^2}{1-x^2}$ do powyższego wzoru dostajemy

$$S(x) = \frac{(1/4 - \lambda - 16\mu^2\omega^2/\hbar^2)x^4 + (1/2 + l(l+1) + \lambda)x^2 - l(l+1)}{(1-x^2)^2}, \quad (3.47)$$

gdzie $\omega = \sqrt{\frac{\chi}{\mu}}$. Jak widać funkcja $S(x)$ ma postać (2.46). Zatem funkcja X wyrażać się będzie przez zwykłą funkcję Riemanna zmiennej $\xi = \kappa x^h$ (2.47), przy czym z (3.47) wynika, że $\kappa = 1$, $h = 2$, więc $\xi = x^2$ oraz

$$S(\xi) = \frac{s_0 x^4 - (s_{-1} + 2s_0)x^2 + (s_0 + s_{-1} + s_{-2})}{(1-x^2)^2}. \quad (3.48)$$

Porównując współczynniki we wzorach (3.47) i (3.48) możemy ustalić wartości stałych s_{-2} , s_{-1} , s_0 i wyznaczyć parametry α , β , γ korzystając ze wzorów (2.48).

Rozwiązaniem równania różniczkowego (3.45) jest zgodnie z rozważaniami rozdziału drugiego funkcja

$$X = \mathbf{p}(x)^{-\frac{1}{2}} P(\xi), \quad (3.49)$$

gdzie funkcja Riemanna $P(\xi)$ dana jest wzorem (2.50), czyli dostajemy

$$X = (1-x^2)^{\gamma-\frac{1}{4}} x^{2\alpha} F\left(\alpha + \beta + \gamma, \alpha - \beta + \gamma - \frac{1}{2}; 2\alpha + 1 - \frac{1}{2}; x^2\right). \quad (3.50)$$

Pamiętając, że $f(k) = \frac{X}{\sin \frac{k}{2}}$ otrzymujemy

$$f(k) = \left(\sin \frac{k}{2}\right)^l \left(\cos \frac{k}{2}\right)^{2(\gamma-\frac{1}{4})} F\left(\alpha + \beta + \gamma, \alpha - \beta + \gamma - \frac{1}{2}; 2\alpha + 1 - \frac{1}{2}; \sin^2 \frac{k}{2}\right), \quad (3.51)$$

przy czym parametry α , β , γ wyrażają się wzorami

$$\alpha = \frac{l}{2} + \frac{1}{2}, \quad \beta = -\frac{1}{4} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\lambda + \frac{16\mu^2\omega^2}{\hbar^2}}, \quad \gamma = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \sqrt{1 + \frac{64\mu^2\omega^2}{\hbar^2}}. \quad (3.52)$$

Mamy dwie możliwości znaku dla β , ale odpowiadają im te same wartości E i te same funkcje falowe (dzięki symetrii $F(a, b; c; x)$ w dwu pierwszych parametrach: $a \longleftrightarrow b$). Warunkiem analityczności funkcji hipergeometrycznej występującej w równaniu (3.51) jest (2.51)

$$\alpha + \beta + \gamma = -n_k \quad (\text{albo } \alpha - \beta + \gamma - \frac{1}{h} = -n_k), \quad n_k = 0, 1, \dots, \quad (3.53)$$

skąd poziomy energetyczne możemy zapisać w postaci

$$E = \frac{\hbar^2}{8\mu} \left(2n_k + l + \frac{3}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{8\mu} \sqrt{1 + \frac{64\mu^2\omega^2}{\hbar^2}} \left(2n_k + l + \frac{3}{2}\right) - \frac{3\hbar^2}{32\mu}. \quad (3.54)$$

Podstawiając $2n_k + l = n$ w powyższym wzorze dostajemy:

$$E = \frac{\hbar^2}{8\mu} \left(n + \frac{3}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{8\mu} \sqrt{1 + \frac{64\mu^2\omega^2}{\hbar^2}} \left(n + \frac{3}{2}\right) - \frac{3\hbar^2}{32\mu}, \quad (3.55)$$

gdzie n -parzyste, to $l = 0, 2, \dots, n$, a gdy n -nieparzyste, to $l = 1, 3, \dots, n$. Wprowadzając liczbę kwantową $j = \frac{n+1}{2}$ wzór (3.55) przyjmuje postać

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu} j(j+1) + \hbar\tilde{\omega} \left((2j-1) + \frac{3}{2} \right), \quad (3.56)$$

gdzie $\tilde{\omega} = \frac{\hbar}{8\mu} \left(\sqrt{1 + \frac{64\mu^2\omega^2}{\hbar^2}} - 1 \right)$, $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ i $l = 0, 2, \dots, (2j-1)$ dla połówkowych wartości j ; $l = 1, 3, \dots, (2j-1)$ dla całkowitych wartości j .

Ostateczny wzór na funkcję radialną $f(k)$ jest następujący

$$f(k) = \sin^l \frac{k}{2} \cos^b \frac{k}{2} F \left(-2j+1, j + \frac{l-1}{2} + 1 + b; l + \frac{3}{2}; \sin^2 \frac{k}{2} \right), \quad (3.57)$$

gdzie $b = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{64\mu^2\omega^2}{\hbar^2}} \right)$.

Poziomy energetyczne układają się znowu jako superpozycja dwóch członów odpowiednio, dla spinorowego bąka swobodnego i dla oscylatora harmonicznego. Po porównaniu (3.56) z odpowiednim wzorem quasiklasycznym (3.35) możemy zauważyć czysto kwantowe efekty:

- spodziewana zamiana $j^2 \rightarrow j(j+1)$ w członie bąka swobodnego,
- oczekiwane $\frac{3}{2}$ w członie oscylatora,
- $\omega \rightarrow \tilde{\omega}$ - zastąpienie infinytezymalnej częstości $\omega = \sqrt{\frac{\chi}{\mu}}$ zmodyfikowaną częstością $\tilde{\omega}$,
- j przybiera wartości od $j = \frac{1}{2}$ „skacząc” co $\frac{1}{2}$.

Przejście graniczne $\chi \rightarrow 0$ daje nam widmo spinorowego bąka swobodnego, wyłączając stan podstawowy $E = 0$.

3.5.2. Problem Coulomba

W przypadku „problemu Coulomba” (3.36)

$$V_k(k) = -\frac{\alpha}{2} \operatorname{ctg} \frac{k}{2},$$

rozwiązania są dobrze określone na $SU(2)$, bowiem potencjał ten dopuszcza stany o $k > \pi$.

Funkcja radialna przyjmuje postać

$$f(k) = \sin^l \frac{k}{2} e^{(-i(2j-l)\frac{k}{2} - bk)} F\left(-2j+l, 1+l+2ib, 2l+2; -2i \sin \frac{k}{2} \exp i \frac{k}{2}\right), \quad (3.58)$$

gdzie $b = \frac{\mu\alpha}{\hbar^2(2j+1)}$, $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$ i $l = 0, 1, \dots, 2j$, zaś poziomy energetyczne dane się wzorem

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu} j(j+1) - \frac{\mu\alpha^2}{2(2j+1)^2 \hbar^2}. \quad (3.59)$$

Porównując (3.59) z odpowiednim wzorem quasiklasycznym (3.38) możemy zauważyć czysto kwantowe efekty:

- spodziewana zamiana $j^2 \rightarrow j(j+1)$ w członie bąka swobodnego,
- zastąpienie $j \rightarrow (j + \frac{1}{2})$ w członie „atomu wodoru”,
- j przybiera wartości od 0 „skacząc” co $\frac{1}{2}$.

Gdy $\alpha \rightarrow 0$ to dostajemy pełne widmo spinorowego bąka swobodnego łącznie z sytuacją gdy $E = 0$. Wszystkie poziomy energetyczne są superpozycją poziomów spinorowego bąka swobodnego i atomu wodoru w \mathbb{R}^3 .

3.5.3. Podsumowanie

Nasze zdegenerowane potencjały, odpowiednie widma i funkcje własne mogą być używane jako modele skończonych drgań torsyjnych molekuł w kryształach molekularnych [4]. Spodziewamy się, że będą grały taką samą rolę jak potencjały: r^2 i $\frac{1}{r}$ w mechanice translacyjnych stopni swobody.

Jest bardzo interesujące, że ruch pod wpływem obu nietrywialnie zdegenerowanych modeli potencjalnych jest superpozycją „spinorowego” bąka swobodnego i odpowiedniego zdegenerowanego problemu Bertranda w płaskiej przestrzeni konfiguracyjnej \mathbb{R}^3 (tzn. $\frac{\chi}{2}r^2$ i $-\frac{\alpha}{r}$ potencjałów). Możemy powiedzieć, że jest to interesujący wkład do ogólnej reguły, zgodnie z którą quasiklasyczne i kwantowe przewidywania dla widma dla całkowicie zdegenerowanych układów są jakościowo zgodne.

3.6. Bąk sferyczny z dylatacjami

W dalszych rozważaniach zajmiemy się zagadnieniem bąka sferycznego z dylatacjami w izotropowym polu sił. Żądamy tu, aby podczas ruchu zachowywał się kształt ciała, ale niekoniecznie rozmiary. Stosunki odległości między punktami materialnymi muszą więc pozostawać stałe. Dopuszczalnymi ruchami są obroty sztywne i dylatacje jednorodne. Jest to zagadnienie mieszczące się w ramach teorii deformacji jednorodnych. Przestrzenią konfiguracyjną Q naszego zagadnienia jest grupa Weyla

$Q = SO(3, \mathbb{R}) \times \mathbb{R}^+$ (lub jej „spinorowa” grupa nakrywająca $Q = SU(2) \times \mathbb{R}^+$). Rozmaitość konfiguracji wewnętrznych składa się z odwzorowań postaci

$$\Phi^i_A(t) = \rho(t)R^i_A(t), \quad (3.60)$$

gdzie $\rho(t) \in \mathbb{R}^+$ jest czynnikiem dylatacyjnym, a $R(t) \in SO(3, \mathbb{R})$ jest izometrią przestrzeni materialnej w przestrzeń fizyczną, $g_{ij}R^i_C R^j_D = \eta_{CD}$; wtedy $g_{ij}\Phi^i_C \Phi^j_D = \rho^2(t)\eta_{CD}$, gdzie η_{CD} jest metryką materialną.

Energia kinetyczna (1.7) przyjmuje postać [29]

$$T = \frac{1}{2}\rho^2(t)\eta_{CD}\hat{\Omega}^C_A \hat{\Omega}^D_B J^{AB}. \quad (3.61)$$

Współtowarzyszącą prędkość afiniczną $\hat{\Omega}$ (1.5), wykorzystując związek (3.60), możemy wyrazić za pomocą wzoru

$$\hat{\Omega}(t) = \rho^{-1}(t)\dot{\rho}(t)\hat{\mathbb{I}} + R^{-1}(t)\dot{R}(t) =: \dot{y}(t)\hat{\mathbb{I}} + \hat{\omega}(t),$$

gdzie $y(t) = \ln \rho(t)$, $\hat{\omega}(t) = R^{-1}(t)\dot{R}(t)$ jest współtowarzyszącą prędkością kątową (3.4), zaś $\hat{\mathbb{I}}$ tensorem jednostkowym.

W zagadnieniach trójwymiarowych, a więc najbardziej interesujących fizycznie, zamiast kwadrupola J używa się często, tzw. tensora momentu bezwładności I . Wiąże się on z J za pomocą następującego wzoru $I = \text{Tr}J\hat{\mathbb{I}} - J$ (1.10). Łatwo pokazać, że zachodzi związek $J = \frac{1}{n-1} \text{Tr}I\hat{\mathbb{I}} - I$, $n = \dim Q$.

W przypadku bąka sferycznego z dylatacjami mamy $I^1 = I^2 = I^3 = \mu$, zatem energię kinetyczną z wydzieleniem czynnika dylatacyjnego i prędkości kątowej właściwego obrotu R możemy zapisać w następującej postaci

$$T = \frac{3\mu}{2}\dot{\rho}^2(t) + \frac{\mu}{2}\rho^2(t) \sum_{i=1}^3 (\hat{\omega}^i)^2. \quad (3.62)$$

Ponieważ rozpatrujemy model izotropowy wygodnie będzie posłużyć się zmiennymi sferycznymi (k, ϑ, ϕ) (3.20) w przestrzeni \vec{k} . Zatem, otrzymujemy

$$T = \frac{K}{2} \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \frac{\mu}{2}\rho^2(t) \left(\left(\frac{dk}{dt} \right)^2 + 4 \sin^2 \frac{k}{2} \left(\frac{d\vartheta}{dt} \right)^2 + 4 \sin^2 \frac{k}{2} \sin^2 \vartheta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right). \quad (3.63)$$

Wprowadzona tu została nowa zmienna K , która w naszym modelu jest równa 3μ . Można sobie jednak formalnie wyobrazić sytuację, kiedy K , μ są niezależnymi

parametrami charakteryzującymi odpowiednio bezwładność ruchu dylatacyjnego i obrotowego. Wyrażenie dla energii kinetycznej będzie miało wtedy postać

$$T = \frac{K}{2} \left[\left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \frac{\mu}{K} \rho^2(t) \left(\left(\frac{dk}{dt} \right)^2 + 4 \sin^2 \frac{k}{2} \left(\frac{d\vartheta}{dt} \right)^2 + 4 \sin^2 \frac{k}{2} \sin^2 \vartheta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right) \right], \quad (3.64)$$

zaś odpowiedni element łuku dany jest przez wyrażenie

$$ds_{(4)}^2 = d\rho^2 + \frac{\mu}{K} \rho^2(t) \left[dk^2 + 4 \sin^2 \frac{k}{2} d\vartheta^2 + 4 \sin^2 \frac{k}{2} \sin^2 \vartheta d\phi^2 \right] = d\rho^2 + \frac{\mu}{K} \rho^2(t) ds_{(3)}^2.$$

Jeśli skorzystamy z możliwości niezależnego manipulowania wielkościami K , μ jako niezależnymi od siebie zmiennymi i położymy $K = \mu$ to $ds_{(4)}^2$ stanie się zwykłą Euklidesową metryką w \mathbb{R}^4 , tzn. $ds^2 = (dx^0)^2 + (dx^1)^2 + (dx^2)^2 + (dx^3)^2$. Całkowita degeneracja wystąpi wtedy dla potencjałów $V_\rho(\rho)$ o następującej postaci funkcyjnej: $V_\rho(\rho) = -\frac{\alpha}{\rho}$, $\alpha > 0$ i $V_\rho(\rho) = \frac{\chi}{2} \rho^2$, $\chi > 0$, tzn. dla zagadnienia Keplera oraz izotropowego oscylatora harmonicznego w \mathbb{R}^4 .

Można sobie wyobrazić fizyczne powody, by zmienne K , μ traktować jako niezależne. Klasyczny przypadek szczególny $K = 3\mu$ odpowiada modom kolektywnym opartym na mechanizmie więzów i zasadzie d'Alemberta. Można sobie jednak wyobrazić inny model kolektywnych stopni swobody oparty, np. na swego rodzaju mechanizmie adiabaticznego odprzegania. Różnica polega na tym, że w przypadku mechanizmu więzów ruch kolektywny jest „duży” i „powolny”, zaś drgania niekolektywne są „małe” i „szybkie”. Przeciwnie, gdy ma miejsce mechanizm adiabaticznego odprzegania, ruchy niekolektywne są „duże”, zaś ruch kolektywny jest efektem uśrednionym zjawisk jedno-cząstkowych zachodzących na poziomie podstawowym. Tego rodzaju mechanizm jest niewykluczony w fizyce jądrowej i zagadnieniach astrofizycznych jak drgania gwiazd. Oczywiście w zastosowaniach jądrowych należy posłużyć się kwantową wersją modelu. Różne niestandardowe modele kolektywne fizyki jądrowej obejmujące drgania dylatacyjne (jak w rozważanym tutaj modelu) są dyskutowane w [14]. Poniżej nie specyfikujemy wartości K i wszystkie rozważania przeprowadzamy dla całkowicie ogólnych parametrów inercyjnych.

Zmienne $(\rho, k, \vartheta, \phi)$ są ortogonalne, więc możemy powołać się na klasyczne twierdzenie Stäckela i wyznaczyć za jego pomocą ogólną postać potencjałów, dla których odpowiednie zagadnienia klasyczne jak i kwantowe będą się w danych zmiennych separowały. Można sprawdzić, że ogólna postać potencjałów jest następująca

$$V(\rho, k, \vartheta, \phi) = V_\rho(\rho) + \frac{V_k(k)}{\rho^2} + \frac{V_\vartheta(\vartheta)}{\rho^2} \sin^{-2} \frac{k}{2} + \frac{V_\phi(\phi)}{\rho^2} \sin^{-2} \frac{k}{2} \sin^{-2} \vartheta. \quad (3.65)$$

Nas interesują wyłącznie modele izotropowe, gdy energia potencjalna V nie zależy od kątów ϑ, ϕ . Najogólniejszą postać potencjałów izotropowych separujących się w zmiennych $(\rho, k, \vartheta, \phi)$ dostaniemy kładąc $V_\vartheta = 0$ i $V_\phi = 0$ we wzorze (3.65), tzn.

$$V(\rho, k) = V_\rho(\rho) + \frac{V_k(k)}{\rho^2}. \quad (3.66)$$

Po wykonaniu przekształcenia Legendre'a możemy Hamiltonian napisać w postaci

$$\begin{aligned} H &= \frac{p_\rho^2}{2K} + V_\rho(\rho) + \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{2\mu} \left(p_k^2 + \frac{p_\vartheta^2}{4} \sin^{-2} \frac{k}{2} + \frac{p_\phi^2}{4} \sin^{-2} \frac{k}{2} \sin^{-2} \vartheta \right) + \frac{V_k(k)}{\rho^2} = \\ &= \frac{p_\rho^2}{2K} + V_\rho(\rho) + \frac{1}{\rho^2} H_{rot}, \end{aligned} \quad (3.67)$$

gdzie $p_\rho, p_k, p_\vartheta, p_\phi$ są pędami kanonicznie sprzężonymi do ρ, k, ϑ, ϕ . Następujące wielkości są stałymi ruchu: H, H_{rot}, M^2, M_3 .

3.7. Stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego. Zmienne działania. Warunki Bohra-Sommerfelda

Stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego dla bąka sferycznego z dylatacjami w zmiennych $(\rho, k, \vartheta, \phi)$ przyjmuje postać

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2K} \left(\frac{\partial S}{\partial \rho} \right)^2 + \frac{1}{2\mu\rho^2} \left(\frac{\partial S}{\partial k} \right)^2 + \frac{1}{8\mu\rho^2} \sin^{-2} \frac{k}{2} \left(\frac{\partial S}{\partial \vartheta} \right)^2 + \\ &+ \frac{1}{8\mu\rho^2} \sin^{-2} \frac{k}{2} \sin^{-2} \vartheta \left(\frac{\partial S}{\partial \phi} \right)^2 + V_\rho(\rho) + \frac{V_k(k)}{\rho^2} = E, \end{aligned} \quad (3.68)$$

gdzie E jest ustaloną wartością energii. Rozwiązania z separacją zmiennych są dane przez

$$S = S_\rho(\rho) + S_k(k) + S_\vartheta(\vartheta) + S_\phi(\phi).$$

Zmienna kątowna ϕ jest cykliczna, zatem $S_\phi(\phi) = \alpha_\phi \phi = M_3 \phi$. Tak więc, otrzymujemy

$$\begin{aligned} p_\phi &= \frac{dS_\phi}{d\phi} = \alpha_\phi, \quad p_k = \frac{dS_k}{dk} = \pm \sqrt{2\mu(A - V_k(k)) - \frac{\alpha_\vartheta^2}{4} \sin^{-2} \frac{k}{2}}, \\ p_\vartheta &= \frac{dS_\vartheta}{d\vartheta} = \pm \sqrt{\alpha_\vartheta^2 - \frac{\alpha_\phi^2}{\sin^2 \vartheta}}, \quad p_\rho = \frac{dS_\rho}{d\rho} = \pm \sqrt{2K(E - V_\rho(\rho)) - \frac{2KA}{\rho^2}}, \end{aligned} \quad (3.69)$$

gdzie $\alpha_\phi, \alpha_\vartheta, A, E$ są stałymi separacji.

Natomiast wyrażenia dla zmiennych działania mają postać

$$J_\phi = \oint p_\phi d\phi = 2\pi\alpha_\phi, \quad J_\vartheta = \oint p_\vartheta d\vartheta = 2\pi(\alpha_\vartheta - \alpha_\phi),$$

$$\begin{aligned}
 J_k &= \pm \oint \sqrt{2\mu(A - V_k(k)) - \frac{(J_\vartheta + J_\phi)^2}{16\pi^2} \sin^{-2} \frac{k}{2}} dk, \\
 J_\rho &= \pm \oint \sqrt{2K(E - V_\rho(\rho)) - \frac{2KA}{\rho^2}} d\rho.
 \end{aligned} \tag{3.70}$$

Wyrażenia J_ϕ , J_ϑ , J_k są identyczne z równaniami (3.28) i (3.29), z tym że miejsce parametru E zajęła stała separacji A . Pozostaje więc tylko do rozwiązania równanie dotyczące zmiennej ρ . Rozwiązywać je będziemy metodą całkowania zespolonego po konturze. W miejsce A należy podstawić odpowiednią wartość parametru E z paragrafów [3.4.1], [3.4.2].

Podstawiając szczególną postać potencjału $V_\rho(\rho)$ możemy w sposób jawny wyznaczyć $J_\rho = J_\rho(E, J_k, J_\vartheta, J_\phi)$, a następnie rozwiązując to wyrażenie względem E znaleźć zależność energii od zmiennych działania J_ρ , J_k , J_ϑ , J_ϕ . Przeprowadzimy również kwantyzację w sensie warunków Bohra-Sommerfelda. Poniżej zajmiemy się prostymi modelami, które dają się efektywnie, analitycznie policzyć [29].

3.7.1. Oscylator harmoniczny

Dla potencjału oscylatora harmonicznego w postaci

$$V_\rho(\rho) = \frac{\Gamma}{2} \rho^2, \quad \Gamma > 0, \tag{3.71}$$

zmienna działania J_ρ , po szeregu obliczeń, przyjmuje postać

$$J_\rho = -\pi\sqrt{2KA} + \frac{\pi KE}{\sqrt{\Gamma K}}. \tag{3.72}$$

Rozwiązując (3.72) względem E dostajemy

$$E = \frac{J_\rho}{\pi} \sqrt{\frac{\Gamma}{K}} + \sqrt{2\Gamma A}. \tag{3.73}$$

a)

W przypadku, gdy obrotową część energii potencjalnej stanowi zdegenerowany oscylator torsyjny (3.31), wówczas stała separacji A dana jest wzorem (3.34). Zatem, zależność energii E od zmiennych działania J_ρ , J_k , J_ϑ , J_ϕ przyjmuje postać

$$E = \frac{J_\rho}{\pi} \sqrt{\frac{\Gamma}{K}} + \sqrt{\frac{J^2 \Gamma}{16\pi^2 \mu} + \frac{J\Gamma}{\pi}} \omega, \tag{3.74}$$

gdzie $J = 2J_k + J_\vartheta + J_\phi$. Mamy do czynienia z dwukrotną degeneracją układu, ponieważ E zależy od J za pośrednictwem wymiernej kombinacji, tzn. $J = 2J_k + J_\vartheta + J_\phi$ ($\nu^k = 2\nu^\vartheta = 2\nu^\phi$). Nie ma degeneracji w zmiennej ρ .

Kwantyzacja w sensie warunków Bohra-Sommerfelda, tzn. $J_\rho = mh$, gdzie h jest stałą Plancka i $m = 0, 1, \dots$, prowadzi do następującego widma energii:

$$E = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{\Gamma}{K}} \left(4m + \sqrt{\frac{4Kj^2}{\mu} + \frac{8(2j)K\omega}{\hbar}} \right), \quad (3.75)$$

gdzie $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$

b)

Natomiast, jeżeli obrotową część energii potencjalnej wyraża „problem Coulomba” (3.36), wtedy stała A ma postać (3.37). Zatem, energia E dana jest wzorem

$$E = \frac{J_\rho}{\pi} \sqrt{\frac{\Gamma}{K}} + \sqrt{\frac{J^2\Gamma}{16\pi^2\mu} - \frac{4\Gamma\pi^2\mu\alpha^2}{J^2}}, \quad (3.76)$$

gdzie $J = J_k + J_\vartheta + J_\phi$. Układ jest dwukrotnie zdegenerowany, gdyż energia E zależy od J za pośrednictwem wymiernej kombinacji zmiennych działania, tzn. $J = J_k + J_\vartheta + J_\phi$ ($\nu^k = \nu^\vartheta = \nu^\phi$). Również nie ma degeneracji w zmiennej ρ .

Widmo Bohra-Sommerfelda ma postać

$$E = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{\Gamma}{K}} \left(4m + \sqrt{\frac{4Kj^2}{\mu} - \frac{\mu\alpha^2 K}{j^2\hbar^4}} \right), \quad (3.77)$$

gdzie $m = 0, 1, \dots$, $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

3.7.2. Potencjał Coulomba

W przypadku potencjału Coulomba

$$V_\rho(\rho) = -\frac{B}{\rho}, \quad B > 0, \quad (3.78)$$

można pokazać, że zmienna działania J_ρ dana jest wzorem

$$J_\rho = \frac{2\pi iKB}{\sqrt{2KE}} - 2\pi\sqrt{2KA}. \quad (3.79)$$

Rozwiązując wyrażenie (3.79) względem E otrzymujemy

$$E = -\frac{2\pi^2KB^2}{\left(J_\rho + 2\pi\sqrt{2KA}\right)^2}. \quad (3.80)$$

a)

Jeśli obrotową część energii potencjalnej stanowi zdegenerowany oscylator torsyjny (3.31), wówczas stała separacji A dana jest wzorem (3.34). Zależność energii E od zmiennych działania $J_\rho, J_k, J_\vartheta, J_\phi$ ma postać

$$E = -\frac{2\pi^2 KB^2}{\left(J_\rho + \sqrt{\frac{J^2 K}{4\mu} + 4K\pi J\omega}\right)^2}, \quad (3.81)$$

gdzie $J = 2J_k + J_\vartheta + J_\phi$. Mamy do czynienia z dwukrotną degeneracją układu, ponieważ energia E zależy od J za pośrednictwem wymiernej kombinacji zmiennych działania, tzn. $J = 2J_k + J_\vartheta + J_\phi$ ($\nu^k = 2\nu^\vartheta = 2\nu^\phi$). Nie ma degeneracji w zmiennej ρ .

Widmo Bohra-Sommerfelda określa wzór

$$E = -\frac{KB^2}{2\hbar^2 \left(m + \sqrt{\frac{j^2 K}{\mu} + \frac{2(2j)K\omega}{\hbar}}\right)^2}, \quad (3.82)$$

gdzie $m = 1, 2, \dots$, $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

b)

Natomiast w przypadku „problemu Coulomba” (3.36) stała A ma postać (3.37). Tak więc, energia E wyraża się wzorem

$$E = -\frac{2\pi^2 KB^2}{\left(J_\rho + \sqrt{\frac{J^2 K}{4\mu} - \frac{16\pi^4 \alpha^2 \mu K}{J^2}}\right)^2}, \quad (3.83)$$

gdzie $J = J_k + J_\vartheta + J_\phi$. Występuje dwukrotna degeneracja układu, ze względu na zależność E od J za pośrednictwem wymiernej kombinacji zmiennych działania, tzn. $J = J_k + J_\vartheta + J_\phi$ ($\nu^k = \nu^\vartheta = \nu^\phi$). Tak jak w powyższym modelu nie ma degeneracji w zmiennej ρ .

Kwantyzacja w sensie warunków Bohra-Sommerfelda prowadzi do następującego widma energii:

$$E = -\frac{KB^2}{2\hbar^2 \left(m + \sqrt{\frac{j^2 K}{\mu} - \frac{\alpha^2 \mu K}{4j^2 \hbar^4}}\right)^2}, \quad (3.84)$$

gdzie $m = 0, 1, 2, \dots$, $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

3.7.3. Przypadki szczególne

Rozpatrzmy potencjał, w którym obrotowa część energii potencjalnej ma strukturę Bertrandą, tzn. a) zdegenerowany oscylator torsyjny $V_k(k) = 2\chi \operatorname{tg}^2 \frac{k}{2}$, b) problem Coulomba $V_k(k) = -\frac{\alpha}{2} \operatorname{ctg} \frac{k}{2}$, natomiast dylatacyjną stanowi potencjał postaci

$$V_\rho(\rho) = \varsigma \left(\frac{1}{\rho^2} + \rho^2 \right), \quad \varsigma > 0. \quad (3.85)$$

Struktura tego potencjału gwarantuje, że ciało nie da się zgnieść do punktu. Uniemożliwia również ruchy z nieograniczonym rozciąganiem się ciała w jakimkolwiek kierunku.

W przypadku potencjału (3.85) obliczenia prowadzą do następującego wyrażenia

$$J_\rho = -\pi\sqrt{2K\zeta + 2KA} + \frac{\pi KE}{\sqrt{2K\zeta}}. \quad (3.86)$$

Rozwiązując (3.86) względem E otrzymujemy

$$E = \sqrt{2}\sqrt{\frac{\zeta}{K}} \left(\frac{J_\rho}{\pi} + \sqrt{2K\zeta + 2KA} \right). \quad (3.87)$$

a)

W miejsce stałej A podstawiamy wyrażenie (3.34) i dostajemy zależność energii od zmiennych działania $J_\rho, J_k, J_\vartheta, J_\phi$ w postaci

$$E = \sqrt{2}\sqrt{\frac{\zeta}{K}} \left(\frac{J_\rho}{\pi} + \sqrt{2K\zeta + \frac{J^2 K}{16\mu\pi^2} + \frac{KJ\omega}{\pi}} \right), \quad (3.88)$$

gdzie $J = 2J_k + J_\vartheta + J_\phi$ ($\nu^k = 2\nu^\vartheta = 2\nu^\phi$).

Kwantyzacja w sensie warunków Bohra-Sommerfelda prowadzi do następującego widma energii:

$$E = \frac{1}{2}\sqrt{2}\hbar\sqrt{\frac{\zeta}{K}} \left(4m + \sqrt{\frac{8K\zeta}{\hbar^2} + \frac{4Kj^2}{\mu} + \frac{8(2j)K\omega}{\hbar}} \right), \quad (3.89)$$

gdzie $m = 0, 1, \dots$, $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

b)

W tym przypadku stała separacji A we wzorze (3.87) dana jest przez wyrażenie (3.37). Tak więc, energia E przyjmuje postać

$$E = \sqrt{2}\sqrt{\frac{\zeta}{K}} \left(\frac{J_\rho}{\pi} + \sqrt{2K\zeta + \frac{J^2 K}{16\mu\pi^2} - \frac{4K\pi^2\mu\alpha^2}{J^2}} \right), \quad (3.90)$$

gdzie $J = J_k + J_\vartheta + J_\phi$ ($\nu^k = \nu^\vartheta = \nu^\phi$).

Widmo Bohra-Sommerfelda wyraża się wzorem

$$E = \frac{1}{2}\sqrt{2}\hbar\sqrt{\frac{\zeta}{K}} \left(4m + \sqrt{\frac{8K\zeta}{\hbar^2} + \frac{4Kj^2}{\mu} - \frac{\mu\alpha^2 K}{j^2\hbar^4}} \right), \quad (3.91)$$

gdzie $m = 0, 1, \dots$, $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

W obu tych modelach mamy również do czynienia z dwukrotną degeneracją układu ze względu na zależność E od J za pośrednictwem wymiernej kombinacji zmiennych działania. Nie ma degeneracji w zmiennej ρ .

3.7.4. Podsumowanie

Przedyskutowaliśmy oddziaływanie całkowicie zdegenerowanych drgań torsyjnych i dylatacji; dynamiką tych ostatnich rządziły pewne naturalne potencjały fenomenologiczne. Okazuje się, że wszystkie te modele są tylko dwukrotnie zdegenerowane i ich trajektorie są gęste na dwuwymiarowych torusach (będących ich domknięciami). Zatem kwantyzacja Bohra-Sommerfelda jest opisywana przez dwie liczby kwantowe (rozumiane w sensie starszej teorii kwantów).

Omówione modele potencjalne są szczególnie ciekawe z tego względu, że odpowiednie zagadnienie kwantowe również można rozwiązać analitycznie.

3.8. Stacjonarne równanie Schrödingera

Rozważania prowadzące do kwantyzacji zagadnienia są identyczne jak w paragrafie [3.5]. Musimy jedynie uwzględnić dodatkowy stopień swobody związany z dylatacją ciała. W przypadku bąka sferycznego z dylatacjami iloczyn skalarny (1.41) wyraża się wzorem

$$\langle \Psi_1(\rho, k, \vartheta, \phi) | \Psi_2(\rho, k, \vartheta, \phi) \rangle = \int \Psi_1^*(\rho, k, \vartheta, \phi) \Psi_2(\rho, k, \vartheta, \phi) \sqrt{|\det[G_{ij}]|} d\rho dk d\vartheta d\phi.$$

Elementy diagonalne tensorów G_{ij} i G^{ij} we współrzędnych $(\rho, k, \vartheta, \phi)$ przyjmują postać

$$\begin{aligned} G_{\rho\rho} &= 1, & G_{kk} &= \frac{\mu}{K} \rho^2, & G_{\vartheta\vartheta} &= \frac{4\mu}{K} \rho^2 \sin^2 \frac{k}{2}, & G_{\phi\phi} &= \frac{4\mu}{K} \rho^2 \sin^2 \frac{k}{2} \sin^2 \vartheta, \\ G^{\rho\rho} &= 1, & G^{kk} &= \frac{K}{\mu\rho^2}, & G^{\vartheta\vartheta} &= \frac{K}{4\mu\rho^2} \sin^{-2} \frac{k}{2}, & G^{\phi\phi} &= \frac{K}{4\mu\rho^2} \sin^{-2} \frac{k}{2} \sin^{-2} \vartheta. \end{aligned}$$

Stacjonarne równanie Schrödingera ma postać

$$\hat{H}\Psi(\rho, k, \vartheta, \phi) = E\Psi(\rho, k, \vartheta, \phi), \quad (3.92)$$

czyli

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2K} \Delta + V(\rho, k) \right) \Psi(\rho, k, \vartheta, \phi) = E\Psi(\rho, k, \vartheta, \phi), \quad (3.93)$$

gdzie

$$\Psi(\rho, k, \vartheta, \phi) = f_\rho(\rho) f_k(k) Y_{lm}(\vartheta, \phi).$$

Operator Laplace'a-Beltramiego w działaniu na funkcję falową wyraża się wzorem

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial\rho^2} + \frac{3}{\rho} \frac{\partial\Psi}{\partial\rho} + \frac{K}{4\mu\rho^2} \sin^{-2} \frac{k}{2} \left[4 \frac{\partial}{\partial k} \left(\sin^2 \frac{k}{2} \frac{\partial\Psi}{\partial k} \right) + \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial\Psi}{\partial\vartheta} \right) + \sin^{-2} \vartheta \frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} \right]. \quad (3.94)$$

Separację równania Schrödingera można przeprowadzić dla potencjału $V(\rho, k) = V_\rho(\rho) + \frac{V_k(k)}{\rho^2}$ (3.66), co prowadzi do układu równań

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2 f_k(k)}{dk^2} + \operatorname{ctg} \frac{k}{2} \frac{df_k(k)}{dk} \right] + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{8\mu} \sin^{-2} \frac{k}{2} f_k(k) + V_k(k) f_k(k) = A f_k(k), \quad (3.95)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2K} \left[\frac{d^2 f_\rho(\rho)}{d\rho^2} + \frac{3}{\rho} \frac{df_\rho(\rho)}{d\rho} \right] + V_\rho(\rho) f_\rho(\rho) + \frac{A}{\rho^2} f_\rho(\rho) = E f_\rho(\rho), \quad (3.96)$$

gdzie A jest stałą separacji, a E ustaloną wartością energii.

Równanie (3.95) jest identyczne z równaniem (3.44), z tym że miejsce parametru E zajęła stała separacji A . Zatem pozostaje do rozwiązania równanie dotyczące zmiennej ρ . W miejsce A należy podstawić odpowiednią wartość parametru E z paragrafów [3.5.1], [3.5.2]. Można spodziewać się, że dla potencjałów (3.71), (3.78), (3.85) otrzymamy ściśle, analityczne rozwiązania równania (3.96) [30].

Równanie (3.96) doprowadzamy do postaci samosprężonej (2.1)

$$\frac{d}{d\rho} \rho^3 \frac{df_\rho(\rho)}{d\rho} - \left(\frac{2KV_\rho(\rho)}{\hbar^2} \rho^3 + \frac{2KA}{\hbar^2} \rho - \frac{2KE}{\hbar^2} \rho^3 \right) f_\rho(\rho) = 0, \quad (3.97)$$

stąd

$$S(\rho) = -\frac{3}{4} - \frac{2KA}{\hbar^2} + \frac{2KE}{\hbar^2} \rho^2 - \frac{2KV_\rho(\rho)}{\hbar^2} \rho^2.$$

3.8.1. Oscylator harmoniczny

W przypadku potencjału oscylatora harmonicznego (3.71)

$$V_\rho(\rho) = \frac{\Gamma}{2} \rho^2$$

funkcja $S(\rho)$ równa jest

$$S(\rho) = -\frac{3}{4} - \frac{2KA}{\hbar^2} + \frac{2KE}{\hbar^2} \rho^2 - \frac{K\Gamma}{\hbar^2} \rho^4 = \sigma_0 + \sigma_1 \rho^h + \sigma_2 \rho^{2h}, \quad h = 2. \quad (3.98)$$

Postać funkcji $S(\rho)$ wskazuje na to, że funkcja $f_\rho(\rho)$ wyrażać się będzie przez konfluentną funkcję Riemanna. Zatem, za pomocą wzorów (2.53)-(2.55) podamy rozwiązanie problemu. Po szeregu obliczeń dostajemy

$$E = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{\frac{\Gamma}{K}} \left(4m + 2 + \sqrt{4 + \frac{8KA}{\hbar^2}} \right), \quad m = 0, 1, \dots \quad (3.99)$$

a)

Gdy obrotową część energii potencjalnej stanowi zdegenerowany oscylator torsyjny (3.31), wówczas stała separacji A dana jest wzorem (3.56). Zatem, widmo wartości własnych energii wyraża się następująco

$$E = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{\frac{\Gamma}{K}} \left(4m + 2 + \sqrt{4 + \frac{4K}{\mu} j(j+1) + \frac{8K}{\hbar} \tilde{\omega} \left((2j-1) + \frac{3}{2} \right)} \right), \quad (3.100)$$

gdzie $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$. Natomiast funkcja $f_\rho(\rho)$ ma postać

$$f_\rho(\rho) = \rho^{-1+v} \kappa^{\frac{1}{4} + \frac{v}{2}} e^{-\frac{\kappa \rho^2}{2}} F_1 \left(-m; 1+v; \kappa \rho^2 \right), \quad (3.101)$$

gdzie $\kappa = \sqrt{\frac{K\Gamma}{\hbar^2}}$, $v = \sqrt{1 + \frac{2KA}{\hbar^2}}$, zaś funkcja radialna $f_k(k)$ dana jest wzorem (3.57).

b)

W przypadku „problemu Coulomba” (3.36) stałą A określa wzór (3.59) i otrzymujemy widmo wartości własnych energii w postaci

$$E = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{\frac{\Gamma}{K}} \left(4m + 2 + \sqrt{4 + \frac{4K}{\mu} j(j+1) - \frac{4K\mu\alpha^2}{\hbar^4(2j+1)^2}} \right), \quad (3.102)$$

gdzie $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$. Natomiast funkcje $f_\rho(\rho)$, $f_k(k)$ dane są odpowiednio przez wyrażenia (3.101), (3.58).

3.8.2. Potencjał Coulomba

Dla potencjału Coulomba (3.78)

$$V_\rho(\rho) = -\frac{B}{\rho},$$

funkcję $S(\rho)$ wyraża wzór

$$S(\rho) = -\frac{3}{4} - \frac{2KA}{\hbar^2} + \frac{2KB}{\hbar^2} \rho + \frac{2KE}{\hbar^2} \rho^2 = \sigma_0 + \sigma_1 \rho^h + \sigma_2 \rho^{2h}, \quad h = 1. \quad (3.103)$$

Jej postać wskazuje na to, że funkcja $f_\rho(\rho)$ wyrażać się będzie przez konfluentną funkcję Riemanna. Zatem, tak jak w powyższym modelu posłużymy się wzorami (2.53)-(2.55) w celu podania rozwiązania problemu. Po prostych obliczeniach otrzymujemy

$$E = -\frac{KB^2}{2\hbar^2 \left(m + \frac{1}{2} + \sqrt{1 + \frac{2KA}{\hbar^2}} \right)^2}, \quad m = 0, 1, \dots \quad (3.104)$$

a)

Jeżeli obrotową część energii potencjalnej stanowi zdegenerowany oscylator torsyjny (3.31), wtedy stała separacji A dana jest wzorem (3.56). Widmo wartości własnych energii wygląda następująco

$$E = -\frac{KB^2}{2\hbar^2 \left(m + \frac{1}{2} + \sqrt{1 + \frac{K}{\mu}j(j+1) + \frac{2K}{\hbar}\tilde{\omega} \left((2j-1) + \frac{3}{2} \right)} \right)^2}, \quad (3.105)$$

gdzie $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$. Natomiast funkcja $f_\rho(\rho)$ wyraża się wzorem

$$f_\rho(\rho) = \rho^{-1+v} \kappa^{\frac{1}{2}+v} e^{-\frac{\kappa\rho}{2}} F_1 \left(-m; 1 + 2v; \kappa\rho \right), \quad (3.106)$$

gdzie $\kappa = \frac{2KB}{\hbar^2(m+\frac{1}{2}+v)}$, $v = \sqrt{1 + \frac{2KA}{\hbar^2}}$, zaś funkcja radialna $f_k(k)$ ma postać (3.57).

b)

Natomiast, jeśli obrotową część energii potencjalnej wyraża „problem Coulomba” (3.36), wówczas stałą A określa wzór (3.59). W tym przypadku widmo wartości własnych energii przyjmuje postać

$$E = -\frac{KB^2}{2\hbar^2 \left(m + \frac{1}{2} + \sqrt{1 + \frac{K}{\mu}j(j+1) - \frac{\mu\alpha^2 K}{\hbar^4(2j+1)^2}} \right)^2}, \quad (3.107)$$

gdzie $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$. Funkcje $f_\rho(\rho)$, $f_k(k)$ dane są wzorami (3.106), (3.58).

3.8.3. Przypadki szczególne

Rozpatrzmy potencjał, w którym obrotowa część energii potencjalnej ma strukturę Bertranda, tzn. a) zdegenerowany oscylator torsyjny $V_k(k) = 2\chi \operatorname{tg}^2 \frac{k}{2}$, b) problem Coulomba $V_k(k) = -\frac{\alpha}{2} \operatorname{ctg} \frac{k}{2}$, natomiast dylatacyjną stanowi potencjał postaci (3.85)

$$V_\rho(\rho) = \varsigma \left(\frac{1}{\rho^2} + \rho^2 \right).$$

W tym przypadku funkcja $S(\rho)$ równa jest

$$S(\rho) = -\frac{3}{4} - \frac{2KA}{\hbar^2} - \frac{2K\varsigma}{\hbar^2} + \frac{2KE}{\hbar^2}\rho^2 - \frac{2K\varsigma}{\hbar^2}\rho^4 = \sigma_0 + \sigma_1\rho^h + \sigma_2\rho^{2h}, \quad h = 2. \quad (3.108)$$

Postać funkcji $S(\rho)$ wskazuje na to, że funkcja $f_\rho(\rho)$ wyrażać się będzie przez konfluentną funkcję Riemanna. Zatem, tak jak w powyższych modelach użyjemy wzorów (2.53)-(2.55) w celu podania rozwiązania problemu. Po szeregu obliczeń otrzymujemy

$$E = \frac{1}{2}\sqrt{2\hbar}\sqrt{\frac{\varsigma}{K}} \left(4m + 2 + \sqrt{4 + \frac{8K\varsigma}{\hbar^2} + \frac{8KA}{\hbar^2}} \right), \quad m = 0, 1, \dots \quad (3.109)$$

a)

Stała separacji A dana jest wzorem (3.56). Widmo wartości własnych energii ma postać

$$E = \frac{1}{2}\sqrt{2\hbar}\sqrt{\frac{\zeta}{K}} \left(4m + 2 + \sqrt{4 + \frac{8K\zeta}{\hbar^2} + \frac{4K}{\mu}j(j+1) + \frac{8K}{\hbar}\tilde{\omega} \left((2j-1) + \frac{3}{2} \right)} \right), \quad (3.110)$$

gdzie $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$. Funkcja $f_\rho(\rho)$ wygląda następująco

$$f_\rho(\rho) = \rho^{-1+\nu} \kappa^{\frac{1}{4}+\frac{\nu}{2}} e^{-\frac{\kappa\rho^2}{2}} F_1 \left(-m; 1 + \nu; \kappa\rho^2 \right), \quad (3.111)$$

gdzie $\kappa = \sqrt{\frac{K\zeta}{\hbar^2}}$, $\nu = \sqrt{1 + \frac{2KA}{\hbar^2} + \frac{2K\zeta}{\hbar^2}}$, a funkcja radialna $f_k(k)$ wyraża się wzorem (3.57).

b)

Natomiast w tym przypadku stała A dana jest przez wyrażenie (3.59). Widmo wartości własnych energii przyjmuje postać

$$E = \frac{1}{2}\sqrt{2\hbar}\sqrt{\frac{\zeta}{K}} \left(4m + 2 + \sqrt{4 + \frac{8K\zeta}{\hbar^2} + \frac{4K}{\mu}j(j+1) - \frac{4K\mu\alpha^2}{\hbar^4(2j+1)^2}} \right), \quad (3.112)$$

gdzie $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$, zaś funkcje $f_\rho(\rho)$, $f_k(k)$ określają wzory (3.111), (3.58).

3.8.4. Podsumowanie

Skutkiem braku całkowitej degeneracji w odpowiednich zagadnieniach klasycznych, topologiczne domknięcia trajektorii klasycznych są dwuwymiarowymi torusami. Rozpatrywane układy są zatem dwukrotnie zdegenerowane. Na poziomie kwantowym fakt ten przejawia się w ten sposób, że poziomy energetyczne są indeksowane przez dwie liczby kwantowe. Nie da się ich skombinować w jedną liczbę kwantową, to znaczy nie zachodzi między nimi degeneracja.

Ścisłe rozwiązania tego rodzaju zagadnień mogą być użyteczne zarówno w fizyce jądrowej i zagadnieniach astrofizycznych jak drgania gwiazd [10]. Oczywiście w zastosowaniach jądrowych należy posłużyć się kwantową wersją modelu. Różne niestandardowe modele kolektywne fizyki jądrowej obejmujące drgania dylatacyjne (jak w rozważanym przez nas modelu) są dyskutowane w [14]. Poza zastosowaniami w kolektywnym modelu jądra i dynamice pojedynczych molekuł (np. P_4), model ten jest też stosowalny w teorii kryształów molekularnych dla wyjaśnienia rozpraszania Ramanowskiego. Nawiasem mówiąc, egzotyczne nieco obiekty, jak np. pęcherzyki gazu w cieczy mają właśnie dylatacyjne stopnie swobody.

Dwuwymiarowe ciało afinicznie sztywne

4.1. Parametryzacja problemu

W rozdziale tym dokonamy klasycznego i kwantowego opisu zagadnienia dwuwymiarowego ciała afinicznie sztywnego przy założeniu podwójnej izotropii - przestrzennej i materialnej. Równania ruchu są wtedy niezmiennicze zarówno względem obrotów fizycznych (lewostronnych) jak i materialnych (prawostronnych). Izotropowość problemu prowadzi do zagadnień o wysokim stopniu symetrii. Ta wysoka symetria sprawia, że istnieje wtedy wiele stałych ruchu, co bardzo ułatwia całkowanie równań. Niestety, w przypadku trójwymiarowym nawet tak daleko idące uproszczenie nie pozwala na rozwiązanie równań ruchu.

Podwójna izotropia równań ruchu jest możliwa tylko wtedy, gdy bezwładność ciała jest izotropowa. Wówczas kwadrupol bezwładności ma symetrię kulistą, tzn.

$$J = \mu \mathbb{1}, \tag{4.1}$$

gdzie μ jest parametrem bezwładnościowym.

Jak zwykle w zagadnieniach podwójnie izotropowych do opisu stopni swobody posłużymy się rozkładem potrójnym (dwubiegunowym) [31], [48], [49], [66], [67], [68]

$$\Phi = ODB^T, \tag{4.2}$$

gdzie $O, B \in SO(n, \mathbb{R})$ są macierzami ortogonalnymi ($O^T O = B^T B = \mathbb{1}$, $\det O = \det B = 1$), zaś D macierzą diagonalną. Nie jest to rozkład jednoznaczny.

Korzystając ze wzorów (1.3) i (4.2) możemy tensory deformacji Greena \mathcal{G} i Cauchyego \mathcal{C} zapisać w postaci

$$\mathcal{G} = BD^2B^T, \quad \mathcal{C}^{-1} = OD^2O^T. \quad (4.3)$$

Macierz D jest skalarną miarą deformacji. Natomiast macierze O i B zawierają „kierunkową” informację o odkształceniu, tzn. informację na temat orientacji odkształcenia względem przestrzeni i ciała. Zatem, mamy do czynienia z trzema podukładami stopni swobody. Myślowo wyodrębniony podukład o stopniach swobody opisywanych przez O nazywać będziemy żyroskopem Cauchyego. Podobnie, element rozkładu B reprezentuje stopnie swobody żyroskopu Greena. Trzecim podukładem jest czysta skalarna deformacja - opisywana przez macierz D . Lagranżowskie obroty sztywne nie działają w ogóle na żyroskop Cauchyego i skalarną deformację, a obracają jedynie żyroskop Greena. Wiąże się to z niezmienniczością tensora Cauchyego względem obrotów materialnych. Na odwrót, niezmienniczość tensora Greena względem obrotów przestrzennych sprawia, że eulerowskie obroty sztywne kręcą żyroskopem Cauchyego, ale nie wpływają na żyroskop Greena i na niezmienniki deformacji. Natomiast na jednoczesne działanie obrotów lagranżowskich i eulerowskich niewrażliwe są wyłącznie niezmienniki deformacji.

Energia potencjalna naszego zagadnienia jest funkcją izotropową, niezmienniczą zarówno względem obrotów fizycznych (lewostronnych) jak i materialnych (prawostronnych). Wynika z tego, że potencjał może być wyrażony zarówno jako funkcja od tensora Greena, jak i od tensora Cauchyego, tzn. $V(\Phi) = V(\mathcal{G}(\Phi)) = V(\mathcal{C}(\Phi))$. Jest to możliwe tylko wtedy, jeśli jest on funkcją niezmienników deformacji D^1, \dots, D^n

$$V(\Phi) = V(D^1, \dots, D^n). \quad (4.4)$$

Zgodnie z teorią sprężystości potencjał powinien mieć minimum w stanie naturalnym, tzn. gdy $D^1 = \dots = D^n = 1$.

Oprócz prędkości uogólnionych $\frac{d\Phi}{dt}$ dla żyroskopowych stopni swobody będziemy również używali, tzw. quasiprędkości, czyli prędkości nieholonomicznych. Wygodnie jest wprowadzić antysymetryczne macierze

$$\chi = \frac{dO}{dt}O^T, \quad \vartheta = \frac{dB}{dt}B^T, \quad (4.5)$$

których niezależne elementy można interpretować jako składowe prędkości kątowych odpowiednio żyroskopów Cauchyego i Greena względem laboratoryjnego układu od-

niesienia. Współtowarzyszące prędkości kątowe względem osi głównych tensorów Cauchyego i Greena w analogiczny sposób określają macierze

$$\hat{\chi} = O^T \frac{dO}{dt}, \quad \hat{\vartheta} = B^T \frac{dB}{dt}. \quad (4.6)$$

Wykorzystując macierze (4.6) oraz macierz D można energię kinetyczną ciała afinicznie sztywnego wyrazić w postaci

$$T = -\frac{\mu}{2} \text{Tr}(D^2 \hat{\chi}^2) - \frac{\mu}{2} \text{Tr}(D^2 \hat{\vartheta}^2) + \mu \text{Tr}(D \hat{\chi} D \hat{\vartheta}) + \frac{\mu}{2} \text{Tr} \left(\frac{dD}{dt} \right)^2, \quad (4.7)$$

gdzie macierz diagonalna $\frac{dD}{dt}$ jest prędkością skalarną deformacji.

4.2. Formalizm kanoniczny

W paragrafie tym podamy jawne wzory na opis przekształcenia Legendre'a w języku rozkładu potrójnego $\Phi = ODB^T$. Jak pamiętamy, rozkład ten sugerował użycie zamiast prędkości uogólnionej $\frac{d\Phi}{dt}$ quasiprędkości danej przez układ $(\hat{\chi}, \hat{\vartheta}, \frac{dD}{dt})$. Aby wykonać przekształcenie Legendre'a musimy użyć wzoru na energię kinetyczną wyrażoną przez $(\hat{\chi}, \hat{\vartheta}, \frac{dD}{dt})$, czyli (4.7). Ostatecznie dostajemy następujące wielkości kanoniczne $(\hat{\rho}, \hat{\tau}, p)$ sprzężone do wielkości $(\hat{\chi}, \hat{\vartheta}, \frac{dD}{dt})$ [48], [49]

$$\hat{\rho} = \mu(-D^2 \hat{\chi} - \hat{\chi} D^2 + 2D \hat{\vartheta} D), \quad \hat{\tau} = \mu(-D^2 \hat{\vartheta} - \hat{\vartheta} D^2 + 2D \hat{\chi} D), \quad p_i = \mu \frac{dD^i}{dt}, \quad (4.8)$$

gdzie $i = 1, \dots, n$. Otrzymane wielkości nieholonomiczne, tzw. quasipędy $\hat{\rho}, \hat{\tau}$ są macierzami antysymetrycznymi, których niezależne elementy są odpowiednimi składowymi momentu pędu żyroskopów Cauchyego i Greena względem układów związanych z osiami własnymi odpowiednich tensorów deformacji. Natomiast p jest macierzą diagonalną. Jej elementy są pędami kanonicznymi p_1, \dots, p_n sprzężonymi do niezmienników deformacji D^1, \dots, D^n .

Quasipędy $\hat{\rho}, \hat{\tau}$ są hamiltonowskimi generatorami lokalnych grup przekształceń

$$\hat{\rho} : \Phi = ODB^T \mapsto (OU)DB^T,$$

$$\hat{\tau} : \Phi = ODB^T \mapsto OD(BU)^T,$$

gdzie $U \in SO(n, \mathbb{R})$. Natomiast wielkości $\rho = O\hat{\rho}O^T, \tau = B\hat{\tau}B^T$ sprzężone kanonicznie do χ, ϑ są generatorami transformacji

$$\rho : \Phi = ODB^T \mapsto (UO)DB^T = U\Phi,$$

$$\tau : \Phi = ODB^T \mapsto OD(UB)^T = \Phi U^T, \quad U \in SO(n, \mathbb{R}),$$

czyli lewych (przestrzennych) i prawych (materialnych) obrotów.

4.3. Płaskie zagadnienie izotropowe

W dalszych rozważaniach zajmiemy się zagadnieniem dwuwymiarowym. Przypadek płaski jest znacznie prostszy niż trójwymiarowy i to zarówno z punktu widzenia rachunków, jak i teorii. Głównym powodem jest różnica w strukturze grup ortogonalnych w dwu i trzech wymiarach. Mają one wręcz przeciwstawne własności: $SO(3, \mathbb{R})$ jest grupą nieprzemienią i prostą, zaś $SO(2, \mathbb{R})$ jest przemienią. Dzięki temu, w przypadku dwuwymiarowym istnieje szeroka klasa potencjałów izotropowych o „fizycznym” kształcie dopuszczających ściśle rozwiązania. Odpowiednie równanie Hamiltona-Jacobiego jak i równanie Schrödingera są separowalne, zaś twierdzenie Stäckela pozwala na podanie wzorów na dość ogólną postać potencjałów „całkowalnych”.

Macierz deformacji Φ możemy zapisać w postaci $\Phi = ODB^T$ (4.2). Prowadzi to do naturalnej parametryzacji zagadnienia

$$O = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} \cos \psi & \sin \psi \\ -\sin \psi & \cos \psi \end{bmatrix}. \quad (4.9)$$

Jak już wspominaliśmy, rozkład $\Phi = ODB^T$ nie jest jednoznaczny. Ze względu na swój dyskretny charakter, ta niejednoznaczność nie jest istotna w zagadnieniach lokalnych. Polega ona na tym, że nie zmieniając macierzy Φ , możemy dokonać permutacji niezmienników, tzn. zamiany D_1, D_2 miejscami, mnożąc jednocześnie macierze O, B od prawej strony przez odpowiedni element $SO(2, \mathbb{R})$. Zatem następujące układy parametrów opisują tę samą konfigurację $\Phi \in GL(2, \mathbb{R})$

$$\Phi(\theta, \psi; D_1, D_2) \equiv \Phi\left(\theta + \frac{\pi}{2}, \psi + \frac{\pi}{2}; D_2, D_1\right) \equiv \Phi\left(\theta - \frac{\pi}{2}, \psi - \frac{\pi}{2}; D_2, D_1\right). \quad (4.10)$$

Również jednoczesny przyrost obydwu kątów o π nic nie zmienia

$$\Phi(\theta + \pi, \psi + \pi; D_1, D_2) \equiv \Phi(\theta, \psi; D_1, D_2), \quad (4.11)$$

gdyż macierze O, B ulegają wtedy pomnożeniu przez macierz $-\mathbb{1}$. Wiąże się to z ogólną własnością grup ortogonalnych w wymiarze parzystym - zawierają one odbicia przestrzenne $-\mathbb{1}$.

W teorii układów dyskretnych, takich jak molekuly, może mieć sens dopuszczenie takich ruchów, podczas których wyznacznik $\det \Phi$ przechodzi przez zero (degeneruje się wymiar ciała), a następnie zmienia znak na ujemny (konfiguracje odbite). W roli przestrzeni konfiguracyjnej wystąpi cała $L(2, \mathbb{R})$ zamiast $GL(2, \mathbb{R})$. Wynika stąd jeszcze

jedno zastrzeżenie dotyczące wieloznaczności opisu: gdy dopuszczamy obydwaj znaki niezmienników, to

$$\Phi(\theta, \psi; -D_1, -D_2) \equiv \Phi(\theta + \pi, \psi; D_1, D_2) \equiv \Phi(\theta, \psi + \pi; D_1, D_2). \quad (4.12)$$

Układ współrzędnych jest osobliwy na powierzchni podobieństw $D_1 = D_2$, gdyż macierz D komutuje wtedy z O , B i kąty θ , ψ z osobną tracą sens. Dobrze określona pozostaje tylko ich różnica $(\theta - \psi)$, a więc macierz OB^T występująca w rozkładzie biegunowym dla Φ . Mamy następującą wieloznaczność opisu związaną z osobliwością współrzędnych

$$\Phi(\theta, \psi; D, D) \equiv \Phi(\theta - \psi, 0; D, D) \equiv \Phi(0, \psi - \theta; D, D). \quad (4.13)$$

W przypadku dwuwymiarowym prędkości kąto- $\hat{\chi}$ i $\hat{\vartheta}$ przyjmują postać

$$\hat{\chi} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{d\theta}{dt} \\ -\frac{d\theta}{dt} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\vartheta} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{d\psi}{dt} \\ -\frac{d\psi}{dt} & 0 \end{pmatrix}.$$

Przemienność grupy $SO(2, \mathbb{R})$ sprawia, że wielkości $\hat{\chi}$, $\hat{\vartheta}$ utożsamiają się z prędkościami uogólnionymi $\frac{d\theta}{dt}$, $\frac{d\psi}{dt}$, odpowiednio. Podobnie, sprzężone do nich quasipędy $\hat{\rho}$, $\hat{\tau}$ utożsamiają się ze zwykłymi pędami kanonicznymi p_θ , p_ψ sprzężonymi do zmiennych θ , ψ

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 0 & p_\theta \\ -p_\theta & 0 \end{pmatrix}, \quad -\hat{\tau} = \begin{pmatrix} 0 & p_\psi \\ -p_\psi & 0 \end{pmatrix}.$$

Wreszcie, co jest bardzo ważne, przestrzenny spin kanoniczny \mathcal{S} i materialna kano-
niczna „vorticity” („wirowość”) \mathcal{V}

$$\mathcal{S}^i_j = \Sigma^i_j - \hat{\Sigma}^i_j, \quad \mathcal{V}^A_B = \hat{\Sigma}^A_B - \hat{\Sigma}^A_B,$$

w których quasipędy Σ , $\hat{\Sigma}$ wyrażają się wzorami (1.18), (1.19), są dokładnie tożsame odpowiednio z $\hat{\rho}$, $\hat{\tau}$: $\mathcal{S} = \hat{\rho}$, $\mathcal{V} = -\hat{\tau}$, co wynika z przemienności $SO(2, \mathbb{R})$. Prowadzi to do tego, że wielkości p_θ , p_ψ , z których zbudowana jest hamiltonowska postać energii kinetycznej, są stałymi ruchu. Fakt ten bardzo upraszcza analizę rozwiązań.

Zakładając kwadrupol bezwładności w postaci $J = \mu \mathbb{1}$ dostajemy na podstawie ogólnego wzoru na energię kinetyczną następujące wyrażenie

$$T = \frac{\mu}{2} \left[(D_1^2 + D_2^2) \left(\left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \left(\frac{d\psi}{dt} \right)^2 \right) - 4D_1D_2 \frac{d\theta}{dt} \frac{d\psi}{dt} + \left(\frac{dD_1}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dD_2}{dt} \right)^2 \right].$$

Łatwo zauważyć, że energia kinetyczna ciała izotropowego nie zależy od macierzy O i B , stąd zmienne kąto- θ i ψ są cykliczne ($0 \leq \theta \leq 2\pi$, $0 \leq \psi \leq 2\pi$). W zmiennych

nieortogonalnych D_1, D_2, θ, ψ zagadnienia klasyczne jak i kwantowe nie separują się nawet w niefizycznym przypadku swobodnym, gdy $V = 0$. Jednak, separacja staje się możliwa, jeśli w płaszczyźnie niezmienników D_1, D_2 wykona się obrót o $\pi/4$, tzn. wprowadzi się nowe zmienne α, β oraz pomocnicze zmienne kątowe η, γ

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(D_1 + D_2), \quad \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}(D_1 - D_2), \quad \eta = \theta - \psi, \quad \gamma = \theta + \psi. \quad (4.14)$$

W makroskopowej, fenomenologicznej teorii sprężystości $D_1 > 0$, $D_2 > 0$, a zatem $\alpha > 0$, $|\beta| < \alpha$. Natomiast, jeśli dopuszczamy konfiguracje osobliwe i odbite (a mamy prawo to czynić przy opisie układów dyskretnych i skończonych, jak np. molekuly), to zarówno D_1, D_2 , jak i α, β mogą być dowolne.

W nowych zmiennych energia kinetyczna przyjmuje postać

$$T = \frac{\mu}{2} \left[\alpha^2 \left(\frac{d\eta}{dt} \right)^2 + \beta^2 \left(\frac{d\gamma}{dt} \right)^2 + \left(\frac{d\alpha}{dt} \right)^2 + \left(\frac{d\beta}{dt} \right)^2 \right]. \quad (4.15)$$

Wykonując przekształcenie Legendre'a otrzymujemy

$$T = \frac{1}{2\mu} \left(p_\alpha^2 + p_\beta^2 + \frac{p_\eta^2}{\alpha^2} + \frac{p_\gamma^2}{\beta^2} \right), \quad (4.16)$$

gdzie $p_\alpha, p_\beta, p_\eta, p_\gamma$ są pędami kanonicznie sprzężonymi do zmiennych $\alpha, \beta, \eta, \gamma$.

W dalszych rozważaniach będziemy używać dwóch typów zmiennych ortogonalnych na płaszczyźnie (α, β) , tzn. kartezjańskich (wprowadzonych powyżej) i biegunowych r, φ zdefiniowanych wzorami

$$\alpha = \sqrt{r} \cos \frac{\varphi}{2}, \quad \beta = \sqrt{r} \sin \frac{\varphi}{2}. \quad (4.17)$$

Ściślej mówiąc, zmiennymi biegunowymi w zwykłym sensie są więc $(\sqrt{r}, \frac{\varphi}{2})$. W rachunkach wygodniejsze są jednak (r, φ) . Zakres zmienności parametrów r, φ zgodny z wymaganiami fenomenologicznymi makroskopowej teorii sprężystości jest następujący $r > 0$, $-\pi/2 < \varphi < \pi/2$. Natomiast w teorii drgań płaskich molekuł możemy osłabić te ograniczenia, dopuszczając $r = 0$ i pełny zakres zmienności kątowej. Energia kinetyczna we współrzędnych biegunowych przyjmuje następującą postać

$$T = \frac{\mu}{2} \left[r \cos^2 \frac{\varphi}{2} \left(\frac{d\eta}{dt} \right)^2 + r \sin^2 \frac{\varphi}{2} \left(\frac{d\gamma}{dt} \right)^2 + \frac{1}{4r} \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + \frac{r}{4} \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right]. \quad (4.18)$$

Dla zmiennych typu kartezjańskiego i biegunowego zagadnienia klasyczne jak i kwantowe są separowalne, co wynika z twierdzenia Stäckela, a otrzymane równania można rozwiązać analitycznie.

Inne zmienne ortogonalne na płaszczyźnie (α, β) , typu zmiennych parabolicznych (ξ, η)

$$\alpha = \frac{1}{2}(\xi^2 - \eta^2), \quad \beta = \xi\eta,$$

czy dwubiegunowych (x, y)

$$\alpha = \frac{a \sinh x}{\cosh x - \cos y}, \quad \beta = \frac{a \sin y}{\cosh x - \cos y},$$

prowadzą do równań nieseparowalnych nawet w niefizycznym przypadku swobodnym, co wynika z występowania członów odśrodkowych (p_η^2/α^2) i (p_γ^2/β^2) .

Ogólna postać potencjałów separujących równanie Hamiltona-Jacobiego oraz równanie Schrödingera, odpowiednio w zmiennych kartezjańskich i biegunowych, jest następująca

$$V(\theta, \psi, \alpha, \beta) = \frac{V_\eta(\theta - \psi)}{\alpha^2} + \frac{V_\gamma(\theta + \psi)}{\beta^2} + V_\alpha(\alpha) + V_\beta(\beta),$$

$$V(\theta, \psi, r, \varphi) = \frac{V_\eta(\theta - \psi)}{r \cos^2 \frac{\varphi}{2}} + \frac{V_\gamma(\theta + \psi)}{r \sin^2 \frac{\varphi}{2}} + V_r(r) + \frac{V_\varphi(\varphi)}{r}.$$

We wzorach tych wyrażenia $V_\eta, V_\gamma, V_\alpha, V_\beta, V_r, V_\varphi$ są dowolnymi, byleby tylko dostatecznie regularnymi funkcjami jednej zmiennej (wskazanej jako argument). Nas interesują wyłącznie modele podwójnie izotropowe, gdy energia potencjalna V nie zależy od kątów θ, ψ (równoważnie - od η, γ). Najogólniejszą postać potencjałów izotropowych separujących się w zmiennych (α, β) lub (r, φ) dostaniemy kładąc $V_\eta = 0$ i $V_\gamma = 0$ w odpowiednich wzorach, tzn.

$$V(\alpha, \beta) = V_\alpha(\alpha) + V_\beta(\beta), \quad V(r, \varphi) = V_r(r) + \frac{V_\varphi(\varphi)}{r}. \quad (4.19)$$

Pojawia się zatem pytanie, czy istnieją potencjały prowadzące do równania Hamiltona-Jacobiego separowalnego jednocześnie w dwóch użytych tu układach współrzędnych $(\alpha, \beta), (r, \varphi)$. Pytanie to jest o tyle ciekawe, że jak wiadomo z mechaniki analitycznej, jednoczesna separowalność w kilku układach współrzędnych wiąże się z reguły z degeneracją problemu oraz z istnieniem dodatkowych stałych ruchu i ukrytych symetrii. Najogólniejsza postać potencjału „uniwersalnie separowalnego” jest następująca

$$V = \frac{A}{\alpha^2} + \frac{B}{\beta^2} + C(\alpha^2 + \beta^2), \quad (4.20)$$

gdzie A, B, C są stałymi. Przez odpowiedni dobór dowolnych funkcji jednej zmiennej, występujących we wzorach na ogólną postać potencjałów, można doprowadzić do tego, że w konfiguracji odniesienia $\Phi = \mathbb{1}$ potencjał będzie miał lokalne minimum i że

w pewnym skończonym otoczeniu tej konfiguracji będą spełnione inne wymagania stawiane potencjałom przez teorię sprężystości.

Znajomość postaci energii kinetycznej i potencjalnej pozwala na zbudowanie funkcji Hamiltona:

1. Zmienne kartezjańskie $H = H_\alpha + H_\beta$:

$$H = \frac{1}{2\mu} \left(\frac{(p_\theta - p_\psi)^2}{4\alpha^2} + p_\alpha^2 \right) + \frac{1}{2\mu} \left(\frac{(p_\theta + p_\psi)^2}{4\beta^2} + p_\beta^2 \right) + V_\alpha(\alpha) + V_\beta(\beta), \quad (4.21)$$

gdzie $p_\alpha, p_\beta, p_\theta, p_\psi$ są pędami kanonicznie sprzężonymi do zmiennych $\alpha, \beta, \theta, \psi$, zaś

$$H_\alpha = \frac{1}{2\mu} \left(\frac{(p_\theta - p_\psi)^2}{4\alpha^2} + p_\alpha^2 \right) + V_\alpha(\alpha), \quad H_\beta = \frac{1}{2\mu} \left(\frac{(p_\theta + p_\psi)^2}{4\beta^2} + p_\beta^2 \right) + V_\beta(\beta).$$

Następujące wielkości są stałymi ruchu: $H_\alpha, H_\beta, p_\theta, p_\psi$.

2. Zmienne biegunowe $H = H_r + \frac{h_\varphi}{r}$:

$$H = \frac{2r}{\mu} p_r^2 + \frac{1}{2r\mu} \left(\frac{p_\theta^2 + p_\psi^2 + 2p_\theta p_\psi \cos \varphi}{\sin^2 \varphi} + 4p_\varphi^2 \right) + V_r(r) + \frac{V_\varphi(\varphi)}{r}, \quad (4.22)$$

gdzie $p_r, p_\varphi, p_\theta, p_\psi$ są pędami kanonicznie sprzężonymi do zmiennych r, φ, θ, ψ , natomiast

$$H_r = \frac{2r}{\mu} p_r^2 + V_r(r), \quad h_\varphi = \frac{1}{2\mu} \left(\frac{p_\theta^2 + p_\psi^2 + 2p_\theta p_\psi \cos \varphi}{\sin^2 \varphi} + 4p_\varphi^2 \right) + V_\varphi(\varphi).$$

W zmiennych biegunowych stałymi ruchu są wielkości: $H, h_\varphi, p_\theta, p_\psi$.

4.4. Stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego. Zmienne działania. Warunki Bohra-Sommerfelda

Stacjonarne równanie Hamiltona-Jacobiego dla płaskiego ciała afinicznie sztywnego w zmiennych kartezjańskich przyjmuje postać

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{4\alpha^2} + \frac{1}{4\beta^2} \right) \left(\left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial \psi} \right)^2 \right) + \left(\frac{1}{2\beta^2} - \frac{1}{2\alpha^2} \right) \frac{\partial^2 S}{\partial \theta \partial \psi} \\ & + \left(\frac{\partial S}{\partial \alpha} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial \beta} \right)^2 = 2\mu (E - (V_\alpha(\alpha) + V_\beta(\beta))), \end{aligned} \quad (4.23)$$

gdzie E jest ustaloną wartością energii. Ponieważ zmienne kątowe θ, ψ są cykliczne, możemy napisać: $S = S_\theta(\theta) + S_\psi(\psi) + S_\alpha(\alpha) + S_\beta(\beta) = a\theta + b\psi + S_\alpha(\alpha) + S_\beta(\beta)$.

Ostatecznie otrzymujemy

$$p_\theta = \frac{dS_\theta}{d\theta} = a, \quad p_\alpha = \frac{dS_\alpha}{d\alpha} = \pm \sqrt{2\mu (E_\alpha - V_\alpha(\alpha)) - \frac{(a-b)^2}{4\alpha^2}},$$

$$p_\psi = \frac{dS_\psi}{d\psi} = b, \quad p_\beta = \frac{dS_\beta}{d\beta} = \pm \sqrt{2\mu(E_\beta - V_\beta(\beta)) - \frac{(a+b)^2}{4\beta^2}},$$

gdzie E_α , E_β , a , b są stałymi separacji.

Natomiast wyrażenia dla zmiennych działania przyjmują postać

$$J_\theta = \oint p_\theta d\theta = 2\pi a, \quad J_\psi = \oint p_\psi d\psi = 2\pi b,$$

$$J_\alpha = \pm \oint \sqrt{2\mu(E_\alpha - V_\alpha(\alpha)) - \frac{(a-b)^2}{4\alpha^2}} d\alpha, \quad (4.24)$$

$$J_\beta = \pm \oint \sqrt{2\mu(E_\beta - V_\beta(\beta)) - \frac{(a+b)^2}{4\beta^2}} d\beta. \quad (4.25)$$

Dla zmiennych biegunowych mamy

$$\begin{aligned} \frac{1}{r \sin^2 \varphi} \left(\left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial \psi} \right)^2 \right) + \frac{2 \cos \varphi}{r \sin^2 \varphi} \frac{\partial^2 S}{\partial \theta \partial \psi} + 4r \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 \\ + \frac{4}{r} \left(\frac{\partial S}{\partial \varphi} \right)^2 = 2\mu \left(E - V_r(r) - \frac{V_\varphi(\varphi)}{r} \right), \end{aligned} \quad (4.26)$$

gdzie E jest ustaloną wartością energii, zaś $S = S_\theta(\theta) + S_\psi(\psi) + S_r(r) + S_\varphi(\varphi) = a\theta + b\psi + S_r(r) + S_\varphi(\varphi)$. W tym przypadku dostajemy

$$p_\theta = \frac{dS_\theta}{d\theta} = a, \quad p_r = \frac{dS_r}{dr} = \pm \sqrt{\frac{\mu}{2r} (E - V_r(r)) - \frac{\mu e_\varphi}{2r^2}},$$

$$p_\psi = \frac{dS_\psi}{d\psi} = b, \quad p_\varphi = \frac{dS_\varphi}{d\varphi} = \pm \sqrt{\frac{\mu}{2} (e_\varphi - V_\varphi(\varphi)) - \frac{a^2 + b^2 + 2ab \cos \varphi}{4 \sin^2 \varphi}},$$

gdzie E , e_φ , a , b są stałymi separacji.

Natomiast zmienne działania mają postać

$$J_\theta = \oint p_\theta d\theta = 2\pi a, \quad J_\psi = \oint p_\psi d\psi = 2\pi b,$$

$$J_r = \pm \oint \sqrt{\frac{\mu}{2r} (E - V_r(r)) - \frac{\mu e_\varphi}{2r^2}} dr, \quad (4.27)$$

$$J_\varphi = \pm \oint \sqrt{\frac{\mu}{2} (e_\varphi - V_\varphi(\varphi)) - \frac{a^2 + b^2 + 2ab \cos \varphi}{4 \sin^2 \varphi}} d\varphi. \quad (4.28)$$

Procedura obliczeniowa w zmiennych kartezjańskich i biegunowych jest następująca:

1. Zmienne kartezjańskie

Podstawiając szczególne postaci potencjałów $V_\alpha(\alpha)$, $V_\beta(\beta)$ do wzorów (4.24), (4.25) możemy obliczyć całki i wyrazić J_α , J_β jako funkcje odpowiednio: $J_\alpha = J_\alpha(E_\alpha, J_\theta, J_\psi)$, $J_\beta = J_\beta(E_\beta, J_\theta, J_\psi)$. Rozwiązując te wyrażenia względem E_α , E_β , czyli $E_\alpha = H_\alpha(J_\alpha, J_\theta, J_\psi)$, $E_\beta = H_\beta(J_\beta, J_\theta, J_\psi)$ otrzymamy zależność energii $E = E_\alpha + E_\beta$ od zmiennych działania $E = H(J_\alpha, J_\beta, J_\theta, J_\psi)$.

2. Zmienne biegunowe

Dla jawnej postaci potencjału $V_\varphi(\varphi)$ możemy obliczyć całkę (4.28) i wyrazić J_φ jako funkcję $J_\varphi = J_\varphi(e_\varphi, J_\theta, J_\psi)$. Rozwiązując to wyrażenie względem e_φ otrzymamy funkcję postaci $e_\varphi = e_\varphi(J_\varphi, J_\theta, J_\psi)$. Podstawiając ją do wzoru (4.27) możemy obliczyć całkę J_r (przy zadanej postaci potencjału $V_r(r)$) i wyrazić J_r jako funkcję $J_r = J_r(E, J_\varphi, J_\theta, J_\psi)$. Rozwiązując to wyrażenie względem E dostaniemy zależność energii od zmiennych działania $E = H(J_r, J_\varphi, J_\theta, J_\psi)$.

Przeprowadzimy również kwantyzację w sensie warunków Bohra-Sommerfelda. Poniżej zajmiemy się prostymi modelami, które dają się efektywnie, analitycznie policzyć. Będzie to model *kartezjańskiego* oraz *biegunowego* potencjału [31].

4.4.1. Model *kartezjańskiego* potencjału.

Rozważmy model *kartezjańskiego* potencjału postaci

$$V(\alpha, \beta) = \frac{C}{4} \left(\alpha^2 + \frac{4}{\alpha^2} \right) + \frac{C}{4} \beta^2, \quad C > 0. \quad (4.29)$$

Zgodnie z wymogami teorii sprężystości potencjał ten ma minimum w stanie naturalnym, tzn. gdy $D_1 = D_2 = 1$, mamy $\alpha = \sqrt{2}$ i $\beta = 0$.

Po szeregu obliczeń otrzymujemy następujące wyrażenia dla zmiennych działania J_α i J_β

$$J_\alpha = -\frac{\pi}{2} \sqrt{8C\mu + (a-b)^2} + \frac{2\pi\mu E_\alpha}{\sqrt{2C\mu}}, \quad (4.30)$$

$$J_\beta = -\frac{\pi}{2} |a+b| + \frac{2\pi\mu E_\beta}{\sqrt{2C\mu}}. \quad (4.31)$$

Rozwiązując odpowiednio (4.30) względem E_α oraz (4.31) względem E_β (pamiętając, że $a = \frac{J_\theta}{2\pi}$, $b = \frac{J_\psi}{2\pi}$) dostajemy

$$E_\alpha = \frac{\omega}{4\pi\sqrt{2}} \left(4J_\alpha + \sqrt{32\mu\pi^2 C + (J_\theta - J_\psi)^2} \right), \quad \omega = \sqrt{\frac{C}{\mu}}, \quad (4.32)$$

$$E_\beta = \frac{\omega}{4\pi\sqrt{2}} (4J_\beta + |J_\theta + J_\psi|). \quad (4.33)$$

Zatem, zależność energii E od zmiennych działania $J_\alpha, J_\beta, J_\theta, J_\psi$ wyraża się wzorem

$$E = \frac{\omega}{4\pi\sqrt{2}} \left(4J + |J_\theta + J_\psi| + \sqrt{32\mu\pi^2 C + (J_\theta - J_\psi)^2} \right), \quad (4.34)$$

gdzie $J = J_\alpha + J_\beta$. Mamy do czynienia z jednokrotną degeneracją układu, ponieważ energia E zależy od J za pośrednictwem wymiernej kombinacji zmiennych działania J_α, J_β ($\nu^\alpha = \nu^\beta$). Natomiast E zależy od J_θ i J_ψ przez ich całkowite kombinacje, ale dwie różne, toteż w tych zmiennych działania nie ma degeneracji.

Przeprowadzając kwantyzację w sensie warunków Bohra-Sommerfelda, tzn. $J = nh, J_\theta = mh, J_\psi = lh$, gdzie h jest stałą Plancka i $n = 0, 1, \dots$; $m, l = 0, \pm 1, \dots$, otrzymujemy następujące widmo energii:

$$E = \frac{1}{2\sqrt{2}} \hbar\omega \left(4n + |m + l| + \sqrt{(m - l)^2 + \frac{8C\mu}{\hbar^2}} \right). \quad (4.35)$$

4.4.2. Model *biegunowego* potencjału.

Rozważmy teraz model *biegunowego* potencjału

$$V(r, \varphi) = \frac{C}{4} \left(r + \frac{4}{r} \right) + \frac{C}{r} t g^2 \frac{\varphi}{2}, \quad C > 0. \quad (4.36)$$

Zgodnie z wymogami teorii sprężystości potencjał ten ma minimum w stanie naturalnym, tzn. gdy $r = 2$ i $\varphi = 0$.

Można pokazać, że wyrażenie dla zmiennej działania J_φ przyjmuje postać

$$J_\varphi = -2\pi \sqrt{\frac{\mu}{2} C + \frac{1}{16} (a - b)^2} - \frac{\pi}{2} |a + b| + 2\pi \sqrt{\frac{\mu}{2} e_\varphi + \frac{\mu}{2} C}. \quad (4.37)$$

Rozwiązując (4.37) względem e_φ (pamiętając, że $a = \frac{J_\theta}{2\pi}, b = \frac{J_\psi}{2\pi}$) otrzymujemy

$$e_\varphi = \left[\sqrt{\frac{1}{2\mu\pi^2} J_\varphi + \sqrt{\frac{1}{32\mu\pi^2} (J_\theta + J_\psi)^2} + \sqrt{C + \frac{1}{32\mu\pi^2} (J_\theta - J_\psi)^2}} \right]^2 - C. \quad (4.38)$$

W celu wyznaczenia energii E korzystamy ze wzoru (4.27) dla zmiennej działania J_r . W tym przypadku obliczenia prowadzą do wyrażenia

$$J_r = \frac{2\pi\mu E}{\sqrt{2C\mu}} - 2\pi \sqrt{\frac{\mu}{2} e_\varphi + \frac{\mu}{2} C}. \quad (4.39)$$

Rozwiązując (4.39) względem E dostajemy

$$E = \frac{J_r}{\pi} \sqrt{\frac{C}{2\mu}} + \sqrt{C^2 + C e_\varphi}, \quad (4.40)$$

gdzie e_φ dane jest wzorem (4.38). Tak więc, zależność energii E od zmiennych działania ma postać

$$E = \frac{\omega}{4\pi\sqrt{2}} \left(4J + |J_\theta + J_\psi| + \sqrt{32\mu\pi^2 C + (J_\theta - J_\psi)^2} \right), \quad (4.41)$$

gdzie $J = J_r + J_\varphi$. W zmiennych biegunowych mamy również do czynienia z jednokrotną degeneracją układu ze względu na zależność energii E od J za pośrednictwem wymiernej kombinacji, tzn. $J = J_r + J_\varphi$ ($\nu^r = \nu^\varphi$). Natomiast E zależy od J_θ i J_ψ przez ich całkowite kombinacje, ale dwie różne, toteż w tych zmiennych działania nie ma degeneracji.

Widmo Bohra-Sommerfelda $J = nh, J_\theta = mh, J_\psi = lh$ ($n = 0, 1, \dots; m, l = 0, \pm 1, \dots$) wyraża się wzorem

$$E = \frac{1}{2\sqrt{2}} \hbar\omega \left(4n + |m + l| + \sqrt{(m - l)^2 + \frac{8C\mu}{\hbar^2}} \right), \quad (4.42)$$

co warto porównać z (4.35).

Jak już wspomniano, współrzędne związane z rozkładem dwubiegunowym obarczone są pewną wieloznacznością oraz osobliwościami. Dla jednej macierzy Φ istnieje wiele trójek $(O, D, B) \in SO(2, \mathbb{R}) \times \text{Diag}(2, \mathbb{R}) \times SO(2, \mathbb{R})$ takich, że $\Phi = ODR^T$. W dalszym ciągu będziemy zbiór trójek (O, D, B) nazywali „rozmaitością opisującą” i oznaczali \tilde{Q} . Jeśli tensor deformacji $\mathcal{G} = \Phi^T \Phi$ jest niezdegenerowany (D ma parami różne elementy na przekątnej), wieloznaczność jest skończona. Permutację elementów na przekątnej można skompensować dodatkowymi czynnikami ortogonalnymi w O, B . Gdy widmo \mathcal{G} (D) jest zdegenerowane, ma miejsce ciągła wieloznaczność przypominająca nieokreśloność kąta przy $\mathbf{r} = 0$ we współrzędnych biegunowych na płaszczyźnie. Ponieważ formalnie posługujemy się w rozkładzie dwubiegunowym trójkami (O, D, B) jako opisem konfiguracji, trzeba w umiejętny sposób uwzględnić wspomniane wieloznaczności przy pomocy dodatkowych warunków. Na poziomie kwantowo-mechanicznym prowadzi to do pewnych korelacji między liczbami kwantowymi sprzężonymi ze zmiennymi kątowymi. Nieuwzględnienie tych korelacji spowodowałoby, że funkcja falowa dobrze określona na iloczynie kartezjańskim \tilde{Q} różniałaby trójki (O, D, B) odpowiadające jednej i tej samej konfiguracji $\Phi = ODB^T$. Byłaby zatem źle określona - wieloznaczna na „prawdziwej” przestrzeni konfiguracyjnej $Q = GL(2, \mathbb{R})$.

Zagadnienie to pojawia się też na poziomie analizy quasiklasycznej opartej na użyciu zmiennych kąta-działanie. Jak wiadomo, istotą sprawy jest tam obliczanie okresów

formy Cartana $\Theta = p_i dq^i$ na niezależnych bazowych cyklach [2], z reguły wybieranych na pewnych rozmaitościach Lagranżowskich leżących na poziomicach energii. Kwantowanie quasiklasyczne wiąże się z warunkami Bohra-Sommerfelda orzekającymi, że okresy te mają być całkowitymi wielokrotnościami stałej Plancka. I tutaj właśnie pojawia się problem wieloznaczności i osobliwości współrzędnych dwubiegunowych. Rzecz w tym, że rozpatrywany kontur w \tilde{Q} , a raczej w wiązce ko-stycznej $T^*\tilde{Q}$ może przebiegać przez punkty, różne w sensie \tilde{Q} , ale reprezentujące ten sam punkt w $GL(2, \mathbb{R})$. Zatem obieg zamknięty zostałby już wykonany po osiągnięciu pierwszego punktu „bliższego” z punktem wyjściowym. Dalej cykl byłby powtarzany.

Wyobraźmy więc sobie, że wykonujemy całkowanie po konturze zaczynającym się w punkcie $z_0 \in \tilde{Q}$ rozmaitości opisującej i kończącym w tymże punkcie. Wyobraźmy sobie, że po drodze mijamy punkt $z_1 \in \tilde{Q}$ (dla uproszczenia - tylko jeden) taki, że w Q odpowiada mu ta sama macierz. Oczywiście, dobrze sformułowane warunki Bohra-Sommerfelda przypisują wartości nh całce po jednym segmencie (z_0, z_1) , gdyż w sensie Q jest to już cała kontura zamknięta. Przyrównując nh całkom po pełnym konturze (z_0, z_1, z_0) w \tilde{Q} wprowadzilibyśmy „fałszywe” stany quasiklasyczne z „połówkowymi” liczbami kwantowymi. Ogólniej, gdy mamy k punktów pośredniczących z_1, \dots, z_k byłyby to ułamki otrzymane z podzielenia liczb całkowitych przez $(k+1)$. Technicznie rzeczywiście liczymy w \tilde{Q} , trzeba jednak wtedy pamiętać, że w sytuacji jak powyżej, po prawej stronie warunków Bohra-Sommerfelda powinny pojawiać się tylko parzyste (ogólniej - tylko podzielne przez $(k+1)$) liczby kwantowe. W naszym przypadku sprowadza to się do tego, że liczba kwantowa $m+l$ jest parzysta (4.35), (4.42). Jest to liczba kwantowa sprzężona z istotnym kątem $(\theta - \psi)$ nieczułym na problemy związane z degeneracją macierzy diagonalnej D .

4.4.3. Podsumowanie

Jednoczesna separowalność równania Hamiltona-Jacobiego dla tego samego potencjału w zmiennych kartezjańskich i biegunowych wiąże się z degeneracją problemu. Okazuje się, że przedyskutowane modele są jednokrotnie zdegenerowane i ich trajektorie są gęste na trójwymiarowych torusach (będących ich domknięciami). Zatem kwantyzacja Bohra-Sommerfelda jest opisywana przez trzy liczby kwantowe (rozumiane w sensie starszej teorii kwantów).

4.5. Stacjonarne równanie Schrödingera

Używana będzie przestrzeń Hilberta $L^2(GL(2, \mathbb{R}), \tilde{\mu})$ z iloczynem skalarnym

$$\langle \Psi_1(q) | \Psi_2(q) \rangle = \int \Psi_1^*(q) \Psi_2(q) \sqrt{|G|} d^f q,$$

gdzie f jest liczbą stopni swobody. Odpowiednio w zmiennych kartezjańskich i biegunowych mamy

$$[G_{ij}] = \begin{bmatrix} \alpha^2 + \beta^2 & \beta^2 - \alpha^2 & 0 & 0 \\ \beta^2 - \alpha^2 & \alpha^2 + \beta^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad [G_{ij}] = \begin{bmatrix} r & -r \cos \varphi & 0 & 0 \\ -r \cos \varphi & r & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4r} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{r}{4} \end{bmatrix}.$$

Operator Hamiltona \hat{H} ma następującą postać

1. Zmienne kartezjańskie

$$\hat{H} = \hat{H}_\alpha + \hat{H}_\beta = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\alpha, \beta), \quad (4.43)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \hat{H}_\alpha &= \frac{1}{2\mu} \left(\frac{1}{\alpha^2} (\hat{\mathcal{S}} - \hat{\mathcal{V}})^2 - \hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) \right) + V_\alpha(\alpha), \\ \hat{H}_\beta &= \frac{1}{2\mu} \left(\frac{1}{\beta^2} (\hat{\mathcal{S}} + \hat{\mathcal{V}})^2 - \hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \right) \right) + V_\beta(\beta). \end{aligned}$$

Wielkość $\hat{\mathcal{S}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta}$ jest operatorem spinu, generatorem obrotów przestrzennych, zaś $\hat{\mathcal{V}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \psi}$ jest operatorem „vorticity” („wirowości”), generatorem obrotów materialnych. Operatory \hat{H}_α , \hat{H}_β , $\hat{\mathcal{S}}$, $\hat{\mathcal{V}}$ są kwantowymi stałymi ruchu. Komutują ze sobą nawzajem i reprezentują współmieralne fizyczne wielkości.

2. Zmienne biegunowe

$$\hat{H} = \hat{H}_r + \frac{\hat{h}_\varphi}{r} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r, \varphi), \quad (4.44)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \hat{H}_r &= -\frac{2\hbar^2}{\mu} \left(r \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V_r(r), \\ \hat{h}_\varphi &= \frac{1}{2\mu} \left(\frac{1}{\sin^2 \varphi} (\hat{\mathcal{S}}^2 + \hat{\mathcal{V}}^2 + 2\hat{\mathcal{S}}\hat{\mathcal{V}} \cos \varphi) - 4\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \text{ctg} \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) + V_\varphi(\varphi). \end{aligned}$$

W tych zmiennych następujące operatory są kwantowymi stałymi ruchu: \hat{H} , \hat{h}_φ , $\hat{\mathcal{S}}$, $\hat{\mathcal{V}}$.

Operator Laplace'a-Beltramiego w działaniu na funkcję falową przyjmuje postać:

1. Zmienne kartezjańskie

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial\alpha^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial\beta^2} + \frac{1}{\alpha}\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha} + \frac{1}{\beta}\frac{\partial\Psi}{\partial\beta} + \left(\frac{1}{4\alpha^2} + \frac{1}{4\beta^2}\right)\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial\psi^2}\right) + \left(\frac{1}{2\beta^2} - \frac{1}{2\alpha^2}\right)\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta\partial\psi}.$$

Stacjonarne równanie Schrödingera ma postać

$$\hat{H}\Psi(\theta, \psi, \alpha, \beta) = E\Psi(\theta, \psi, \alpha, \beta), \quad (4.45)$$

gdzie

$$\Psi(\theta, \psi, \alpha, \beta) = f_\theta(\theta)f_\psi(\psi)f_\alpha(\alpha)f_\beta(\beta), \quad (4.46)$$

oraz $f_\theta(\theta) = e^{im\theta}$, $f_\psi(\psi) = e^{il\psi}$ ($m, l = 0, \pm 1, \dots$).

2. Zmienne biegunowe

$$\Delta\Psi = \frac{1}{r\sin^2\varphi}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial\psi^2}\right) + \frac{2\cos\varphi}{r\sin^2\varphi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta\partial\psi} + 4r\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2} + 8\frac{\partial\Psi}{\partial r} + \frac{4}{r}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2} + \operatorname{ctg}\varphi\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi}\right).$$

Stacjonarne równanie Schrödingera wyraża się wzorem

$$\hat{H}\Psi(\theta, \psi, r, \varphi) = E\Psi(\theta, \psi, r, \varphi), \quad (4.47)$$

gdzie

$$\Psi(\theta, \psi, r, \varphi) = f_\theta(\theta)f_\psi(\psi)f_r(r)f_\varphi(\varphi). \quad (4.48)$$

Separacja równań (4.45) i (4.47) prowadzi przy uwzględnieniu (4.46), (4.48) oraz potencjałów postaci (4.19), czyli $V(\alpha, \beta) = V_\alpha(\alpha) + V_\beta(\beta)$, $V(r, \varphi) = V_r(r) + \frac{V_\varphi(\varphi)}{r}$ do układu równań:

1. Zmienne kartezjańskie

$$\frac{d^2f_\alpha(\alpha)}{d\alpha^2} + \frac{1}{\alpha}\frac{df_\alpha(\alpha)}{d\alpha} - \frac{(m-l)^2}{4\alpha^2}f_\alpha(\alpha) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_\alpha - V_\alpha(\alpha))f_\alpha(\alpha) = 0, \quad (4.49)$$

$$\frac{d^2f_\beta(\beta)}{d\beta^2} + \frac{1}{\beta}\frac{df_\beta(\beta)}{d\beta} - \frac{(m+l)^2}{4\beta^2}f_\beta(\beta) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_\beta - V_\beta(\beta))f_\beta(\beta) = 0, \quad (4.50)$$

$$E = E_\alpha + E_\beta.$$

2. Zmienne biegunowe

$$\frac{d^2f_r(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{df_r(r)}{dr} + \frac{\mu}{2\hbar^2r}\left(E - V_r(r) - \frac{e_\varphi}{r}\right)f_r(r) = 0, \quad (4.51)$$

$$\frac{d^2f_\varphi(\varphi)}{d\varphi^2} + \operatorname{ctg}\varphi\frac{df_\varphi(\varphi)}{d\varphi} - \left(\frac{m^2 + l^2 + 2ml\cos\varphi}{4\sin^2\varphi} + \frac{\mu}{2\hbar^2}(V_\varphi(\varphi) - e_\varphi)\right)f_\varphi(\varphi) = 0, \quad (4.52)$$

gdzie e_φ jest stałą separacji, a E ustaloną wartością energii.

Równania (4.49), (4.50), (4.51), (4.52) dają się rozwiązać dopiero wtedy, gdy zadana zostanie jawnie postać potencjałów $V(\alpha, \beta) = V_\alpha(\alpha) + V_\beta(\beta)$, $V(r, \varphi) = V_r(r) + \frac{V_\varphi(\varphi)}{r}$. Można spodziewać się prostych rozwiązań wyrażających się analitycznie przez znane funkcje specjalne tylko w tych przypadkach, gdy potencjał będzie posiadał jakieś szczególne własności geometryczne, np. związane z degeneracją odpowiedniego problemu klasycznego lub z występowaniem ukrytych symetrii. Poniżej zbadany zostanie model *kartezjańskiego* oraz *biegunowego* potencjału [32].

4.5.1. Model *kartezjańskiego* potencjału.

Rozważmy model *kartezjańskiego* potencjału postaci (4.29), czyli

$$V(\alpha, \beta) = \frac{C}{4} \left(\alpha^2 + \frac{4}{\alpha^2} \right) + \frac{C}{4} \beta^2, \quad C > 0.$$

Jak już wspominaliśmy, potencjał ten ma minimum w stanie naturalnym, tzn. gdy $\alpha = \sqrt{2}$ i $\beta = 0$. Nie jest jednak w stanie zakazać stanów o $|\beta| \geq \alpha$, a więc o $\det\Phi \leq 0$. Dopuszczalne więc są stany osobliwe (inwersje cząsteczki względem początku układu odniesienia).

Rozważmy równania (4.49) i (4.50). Doprowadzamy je do postaci samosprężonej (2.1)

$$\frac{d}{d\alpha} \alpha \frac{df_\alpha(\alpha)}{d\alpha} - \left(\frac{(m-l)^2}{4\alpha} + \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2} V_\alpha(\alpha) - \frac{2\mu}{\hbar^2} E_\alpha \alpha \right) f_\alpha(\alpha) = 0, \quad (4.53)$$

$$\frac{d}{d\beta} \beta \frac{df_\beta(\beta)}{d\beta} - \left(\frac{(m+l)^2}{4\beta} + \frac{2\mu\beta}{\hbar^2} V_\beta(\beta) - \frac{2\mu}{\hbar^2} E_\beta \beta \right) f_\beta(\beta) = 0. \quad (4.54)$$

Funkcje $S(\alpha)$ i $S(\beta)$ dane są przez wyrażenia

$$\begin{aligned} S(\alpha) &= \frac{1}{4} - \frac{(m-l)^2}{4} - \frac{2\mu}{\hbar^2} V_\alpha(\alpha) \alpha^2 + \frac{2\mu}{\hbar^2} E_\alpha \alpha^2 = \frac{1}{4} - \frac{(m-l)^2}{4} - \frac{2C\mu}{\hbar^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E_\alpha \alpha^2 - \frac{C\mu}{2\hbar^2} \alpha^4 = \\ &= \sigma_0 + \sigma_1 \alpha^h + \sigma_2 \alpha^{2h}, \quad h = 2, \end{aligned} \quad (4.55)$$

oraz

$$\begin{aligned} S(\beta) &= \frac{1}{4} - \frac{(m+l)^2}{4} - \frac{2\mu}{\hbar^2} V_\beta(\beta) \beta^2 + \frac{2\mu}{\hbar^2} E_\beta \beta^2 = \frac{1}{4} - \frac{(m+l)^2}{4} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E_\beta \beta^2 - \frac{C\mu}{2\hbar^2} \beta^4 = \\ &= \sigma_0 + \sigma_1 \beta^h + \sigma_2 \beta^{2h}, \quad h = 2. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Postacie funkcji $S(\alpha)$ i $S(\beta)$ wskazują na to, że funkcje $f_\alpha(\alpha)$ i $f_\beta(\beta)$ wyrażać się będą przez konfluentną funkcję Riemanna.

Po szeregu obliczeń dostajemy następujące widmo wartości własnych energii $E = E_\alpha + E_\beta$

$$E = \frac{1}{2\sqrt{2}}\hbar\omega \left(4n + 4 + |m + l| + \sqrt{(m - l)^2 + \frac{8C\mu}{\hbar^2}} \right), \quad n = n_\alpha + n_\beta, \quad (4.57)$$

gdzie

$$E_\alpha = \frac{\hbar\omega}{2\sqrt{2}} \left(4n_\alpha + 2 + \sqrt{(m - l)^2 + \frac{8C\mu}{\hbar^2}} \right), \quad E_\beta = \frac{\hbar\omega}{2\sqrt{2}} (4n_\beta + 2 + |m + l|), \quad (4.58)$$

oraz $\omega = \sqrt{\frac{C}{\mu}}$; $n_\alpha, n_\beta = 0, 1, \dots$. Natomiast funkcje $f_\alpha(\alpha)$ i $f_\beta(\beta)$ są postaci

$$f_\alpha(\alpha) = \alpha^\chi \kappa^{\frac{1}{4} + \frac{\chi}{2}} e^{-\frac{\kappa}{2}\alpha^2} F_1(-n_\alpha; 1 + \chi; \kappa\alpha^2), \quad (4.59)$$

$$f_\beta(\beta) = \beta^v \kappa^{\frac{1}{4} + \frac{v}{2}} e^{-\frac{\kappa}{2}\beta^2} F_1(-n_\beta; 1 + v; \kappa\beta^2), \quad (4.60)$$

gdzie $\chi = \frac{1}{2}\sqrt{(m - l)^2 + \frac{8C\mu}{\hbar^2}}$, $\kappa = \sqrt{\frac{C\mu}{2\hbar^2}}$, $v = \frac{1}{2}|m + l|$.

4.5.2. Model *biegunowego* potencjału

Następnie rozważmy model *biegunowego* potencjału (4.36), czyli

$$V(r, \varphi) = \frac{C}{4} \left(r + \frac{4}{r} \right) + \frac{C}{r} \operatorname{tg}^2 \frac{\varphi}{2}, \quad C > 0.$$

Wspominaliśmy już, że potencjał ten ma minimum w stanie naturalnym, tzn. gdy $r = 2$ i $\varphi = 0$. Dopuszcza on stany o $|\varphi| > \frac{\pi}{2}$ (są to stany opisujące inwersję ciała).

Rozważmy teraz równanie (4.52). Dzięki podstawieniu $x = \cos^2 \frac{\varphi}{2}$ równanie to możemy zapisać w postaci

$$\frac{d}{dx} x(1-x) \frac{df_x(x)}{dx} - \left(\frac{(m+l)^2}{16x(1-x)} - \frac{4ml(1-x)}{16x(1-x)} + \frac{\mu}{2\hbar^2} V_x(x) - \frac{\mu}{2\hbar^2} e_\varphi \right) f_x(x) = 0. \quad (4.61)$$

Funkcja $S(x)$ wyraża się wzorem

$$S(x) = \frac{\frac{1}{4}(1-2x)^2 + x(1-x) - \frac{1}{16}(m+l)^2 + \frac{1}{4}ml(1-x) - \frac{\mu}{2\hbar^2} V_x(x)x(1-x)}{(1-x)^2} + \frac{\frac{\mu}{2\hbar^2} e_\varphi x(1-x)}{(1-x)^2},$$

gdzie $V_x(x) = C \frac{1-x}{x}$.

Postać funkcji $S(x)$ wskazuje na to, że funkcja $f_x(x)$ wyrażać się będzie przez zwykłą funkcję Riemanna. Korzystając ze wzorów (2.46)-(2.51) podamy rozwiązanie problemu.

Po prostych obliczeniach dostajemy

$$e_\varphi = \frac{\hbar^2}{8\mu} \left(\left(4n_\varphi + 2 + |m+l| + \sqrt{(m-l)^2 + \frac{8C\mu}{\hbar^2}} \right)^2 - 4 - \frac{8C\mu}{\hbar^2} \right), \quad (4.62)$$

gdzie $n_\varphi = 0, 1, \dots$. Natomiast funkcja $f_\varphi(\varphi)$ wyraża się wzorem

$$f_\varphi(\varphi) = \left(\cos \frac{\varphi}{2} \right)^\chi \left(\sin \frac{\varphi}{2} \right)^v F \left(-n_\varphi, 1 + n_\varphi + v + \chi; 1 + \chi; \cos^2 \frac{\varphi}{2} \right), \quad (4.63)$$

gdzie $\chi = \frac{1}{2} \sqrt{(m-l)^2 + \frac{8C\mu}{\hbar^2}}$, $v = \frac{1}{2}|m+l|$.

Zajmijmy się teraz równaniem (4.51). Doprowadzając je do postaci samosprężonej otrzymujemy

$$\frac{d}{dr} r^2 \frac{df_r(r)}{dr} - \left(\frac{\mu}{2\hbar^2} V_r(r)r + \frac{\mu}{2\hbar^2} e_\varphi - \frac{\mu}{2\hbar^2} Er \right) f_r(r) = 0. \quad (4.64)$$

Funkcja $S(r)$ dana jest wzorem

$$\begin{aligned} S(r) &= -\frac{\mu}{2\hbar^2} e_\varphi - \frac{\mu}{2\hbar^2} V_r(r)r + \frac{\mu}{2\hbar^2} Er = -\frac{C\mu}{2\hbar^2} - \frac{\mu}{2\hbar^2} e_\varphi + \frac{\mu}{2\hbar^2} Er - \frac{C\mu}{8\hbar^2} r^2 = \\ &= \sigma_0 + \sigma_1 r^h + \sigma_2 r^{2h}, \quad h = 1. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Jej postać wskazuje na to, że funkcja $f_r(r)$ wyrażać się będzie przez konfluentną funkcję Riemanna. Zatem, tak jak w poprzednim paragrafie, posłużymy się wzorami (2.53)-(2.55) w celu podania rozwiązania problemu.

Po szeregu obliczeń otrzymujemy następujące rozwiązanie

$$E = \frac{1}{2\sqrt{2}} \hbar\omega \left(4n_r + 2 + \sqrt{4 + \frac{8\mu}{\hbar^2} e_\varphi + \frac{8C\mu}{\hbar^2}} \right), \quad (4.66)$$

gdzie $\omega = \sqrt{\frac{C}{\mu}}$, $n_r = 0, 1, \dots$, zaś e_φ dane jest wzorem (4.62). Funkcja $f_r(r)$ jest postaci

$$f_r(r) = r^{-\frac{1}{2}+\epsilon} \kappa^{\frac{1}{2}+\epsilon} e^{-\frac{\kappa}{2}r} F_1 \left(-n_r; 1 + 2\epsilon; \kappa r \right), \quad (4.67)$$

gdzie $\kappa = \sqrt{\frac{C\mu}{2\hbar^2}}$, $\epsilon = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{2\mu}{\hbar^2} e_\varphi + \frac{2C\mu}{\hbar^2}}$.

Zatem, widmo wartości własnych energii ma postać

$$E = \frac{1}{2\sqrt{2}} \hbar\omega \left(4n + 4 + |m+l| + \sqrt{(m-l)^2 + \frac{8C\mu}{\hbar^2}} \right), \quad n = n_r + n_\varphi, \quad (4.68)$$

co warto porównać z (4.57).

Związki (4.10)-(4.13) narzucają warunki na rozwiązanie równania Schrödingera. Funkcje falowe wyrażone przez argumenty rozkładu dwubiegunowego nie mogą różnić tych zespołów zmiennych, które odpowiadają tej samej macierzy Φ . Oznaczałoby to bowiem, że byłyby one wieloznaczne jako funkcje na „prawdziwej” przestrzeni konfiguracyjnej, czyli rozmaitości macierzy Φ . To zaś jest sprzeczne z jednym z podstawowych postulatów mechaniki kwantowej, że funkcja falowa jest jednoznaczna (do stałego czynnika fazowego) na klasycznej przestrzeni konfiguracyjnej.

Ze związków (4.10)-(4.12) wynika, że wyrażenie funkcji falowej przez zależność od parametrów rozkładu dwubiegunowego, czyli

a) zmienne kartezjańskie

$$\Psi(\theta, \psi; \alpha, \beta) \equiv \Psi\left(\theta + \frac{\pi}{2}, \psi + \frac{\pi}{2}; \alpha, -\beta\right) \equiv \Psi\left(\theta - \frac{\pi}{2}, \psi - \frac{\pi}{2}; \alpha, -\beta\right), \quad (4.69)$$

$$\Psi(\theta + \pi, \psi + \pi; \alpha, \beta) \equiv \Psi(\theta, \psi; \alpha, \beta), \quad (4.70)$$

$$\Psi(\theta, \psi; -\alpha, -\beta) \equiv \Psi(\theta + \pi, \psi; \alpha, \beta) \equiv \Psi(\theta, \psi + \pi; \alpha, \beta). \quad (4.71)$$

b) zmienne biegunowe

$$\Psi(\theta, \psi; r, \varphi) \equiv \Psi\left(\theta + \frac{\pi}{2}, \psi + \frac{\pi}{2}; r, -\varphi\right) \equiv \Psi\left(\theta - \frac{\pi}{2}, \psi - \frac{\pi}{2}; r, -\varphi\right), \quad (4.72)$$

$$\Psi(\theta + \pi, \psi + \pi; r, \varphi) \equiv \Psi(\theta, \psi; r, \varphi), \quad (4.73)$$

$$\Psi(\theta, \psi; r, \varphi + 2\pi) \equiv \Psi(\theta + \pi, \psi; r, \varphi) \equiv \Psi(\theta, \psi + \pi; r, \varphi), \quad (4.74)$$

będzie jednoznaczne na „prawdziwej” przestrzeni konfiguracyjnej (czyli rozmaitości macierzowej parametryzowanej przez (D_1, D_2, θ, ψ) , $(\alpha, \beta, \theta, \psi)$, $(r, \varphi, \theta, \psi)$ w sposób obarczony wieloznacznością) pod warunkiem co łatwo sprawdzić, że $m + l$ jest liczbą parzystą. Inaczej mówiąc liczby kwantowe m, l nie są zupełnie niezależne, lecz muszą mieć tę samą parzystość (jednocześnie parzyste lub jednocześnie nieparzyste). Tym samym kąty θ, ψ nie są być może najlepszą parametryzacją związaną z rozkładem Φ na iloczyny innych macierzy. To samo sugeruje zresztą fakt, że klasyczna energia kinetyczna (metryka na wewnętrznej przestrzeni konfiguracyjnej) nie jest w nich diagonalna, lecz zawiera wyraz „interferencyjny” typu $\frac{d\theta}{dt} \frac{d\psi}{dt}$. Wyraz „krzyżowy” eliminujemy przez wprowadzenie nowych kątów: $\eta = \theta - \psi$, $\gamma = \theta + \psi$. Okazuje się, że liczby kwantowe u, w (odpowiadające kątom η, γ w sensie funkcji wykładniczych $e^{iu\eta}$, $e^{iw\gamma}$) sprzężone do kątów η, γ nie są poddane ograniczeniom powyższego typu („współparzystość”), lecz są całkowicie dowolnymi liczbami całkowitymi. Natomiast m, l wyrażające się przez ich sumę i różnicę automatycznie spełniają warunki jednokowej parzystości.

Ta niedogodność kątów θ , ψ wiąże się też z ich nieokreślonością w konfiguracji dylatacyjnej, gdy $D_1 = D_2 = D$. Ze związków identyfikacyjnych dla zespołu parametrów charakteryzujących tę samą konfigurację (4.13), wynika że funkcje własne spinu i „vorticity” spełniają

$$e^{i(m+l)(\theta-\psi)} f_{ml}(D, D) = f_{ml}(D, D).$$

Mamy więc dwie możliwości:

a)

$$f_{ml}(D, D) = 0 \quad \text{dla dowolnego } D,$$

b)

$$m + l = 0, \quad \text{tzn. } m = -l,$$

tylko $f_{m,-m}$ może nie znikać w (D, D) .

Uwaga.

Przypomina to warunki na funkcje falowe we współrzędnych sferycznych w \mathbb{R}^3 lub biegunowych w \mathbb{R}^2 . Funkcje falowe dla zagadnień sferycznych (np. dla atomu wodoropodobnego)

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}, \vartheta, \phi) = f_{nl}(\mathbf{r}) Y_{lm}(\vartheta, \phi)$$

muszą spełniać jeden z warunków:

- $f_{nl}(0) = 0$, gdy $l \neq 0$,
- $l = 0$ (stan s).

Powodem jest, że dla $\mathbf{r} = 0$ współrzędne ϑ, ϕ nie są w ogóle dobrze określone i funkcje falowe nie spełniające powyższych warunków nie byłyby jednoznacznie określone (różne wartości Ψ dla różnych ϑ, ϕ , które przy $\mathbf{r} = 0$ odpowiadają temu samemu punktowi w \mathbb{R}^3).

W naszym przypadku odpowiednikiem sytuacji $\mathbf{r} = 0$ jest $D_1 = D_2 = D$, czyli w zmiennych kartezjańskich i biegunowych odpowiednio: $\beta = 0$, $\varphi = 0(2\pi)$. Jak wspomniano kąty „bipolarne” θ, ψ są w tych konfiguracjach z osobna nieokreślone (jak ϑ, ϕ dla $\mathbf{r} = 0$ w zmiennych sferycznych) i w związku z tym wieloznaczność wyrażenia $e^{i(m+l)(\theta-\psi)}$ w $\beta = 0$, $\varphi = 0(2\pi)$ musi być „wygaszona” znikaniem f_{ml} . Jeśli $m + l = 0$, część „kątowna” jest stała i nie prowadzi do wieloznaczności w osobliwych punktach $\beta = 0$, $\varphi = 0(2\pi)$.

Jest to warunek ogólny. Warto jednak podkreślić, że podobnie jak w sferycznie symetrycznych zagadnieniach w \mathbb{R}^3 (atom wodoru, czyli przyciągający potencjał Co-

ulomba, izotropowy oscylator harmoniczny), funkcje własne dla Hamiltonianu automatycznie spełniają ten warunek.

4.5.3. Podsumowanie

Separacja równania Schrödingera dla tego samego potencjału

$$V = \frac{C}{4} \left(\alpha^2 + \frac{4}{\alpha^2} \right) + \frac{C}{4} \beta^2 = \frac{C}{4} \left(r + \frac{4}{r} \right) + \frac{C}{r} t g^2 \frac{\varphi}{2},$$

w zmiennych kartezjańskich i biegunowych świadczy o dodatkowych symetriach zagadnienia, co prowadzi do degeneracji problemu. Skutkiem braku całkowitej degeneracji w odpowiednich zagadnieniach klasycznych, topologiczne domknięcia trajektorii klasycznych są trójwymiarowymi torusami. Rozpatrywane układy są zatem jednokrotnie zdegenerowane. Na poziomie kwantowym fakt ten przejawia się w ten sposób, że poziomy energetyczne są indeksowane przez trzy liczby kwantowe. Nie da się ich skombinować w jedną liczbę kwantową, to znaczy nie zachodzi między nimi degeneracja.

Ścisłe rozwiązania zagadnień dwuwymiarowych mogą być użyteczne zarówno w rozmaitych makroskopowych zagadnieniach sprężystych (cylinder z przekrojem deformowalnym jednorodnie, ciała płaskie), jak i w niektórych zagadnieniach mikrofizycznych, np. w teorii drgań płaskich molekuł (S_8 , C_6H_6 , O_3) i ich gromad (kryształy molekularne, mikrosprężyste ośrodki). Możliwe są również zastosowania w dynamice cieczy [5]. Zagadnienia dwuwymiarowe istotne są nie tylko z czysto filozoficznego punktu widzenia jako fizyka „Flatlandii” [1]. Mogą one też być użyteczne w teorii płyt i powłok z mikrostrukturą, w dynamice membran i podobnych zagadnieniach.

Wnioski

W pracy dokonano próby klasycznego i kwantowego opisu dwóch modeli ciała deformowalnego jednorodnie. Okazuje się, że istnieje związek pomiędzy klasycznym i kwantowym problemem degeneracji. Widać to wyraźnie w przypadku modeli Bertranda. Zagadnienia, dla których klasyczne trajektorie ruchu są zamknięte prowadzą do kwantowych problemów o wysokim stopniu degeneracji. Dla zagadnienia bąka sferycznego z dylatacjami, skutkiem braku całkowitej degeneracji w odpowiednich klasycznych problemach, topologiczne domknięcia trajektorii są dwuwymiarowymi torusami, a omówione modele są dwukrotnie zdegenerowane. W przypadku dwuwymiarowego ciała afinicznie sztywnego została wyróżniona rodzina problemów jednokrotnie zdegenerowanych, dla których topologiczne domknięcia klasycznych trajektorii są trójwymiarowymi torusami, a energia potencjalna ma postać zezwalającą na separację równania Hamiltona-Jacobiego i równania Schrödingera w dwóch układach współrzędnych.

Zbieżność między degeneracją klasyczną, a kwantową oraz możliwość rozwiązania równań kwantowych metodą wielomianów Sommerfelda wydaje się interesująca i warta dalszych badań, podobnie jak sprawa kwantyzacji zagadnień klasycznych i kwasyklasycznego traktowania problemów kwantowych.

Jak zwykle w zagadnieniach o wysokiej symetrii i dobrze określonej, przejrzystej strukturze geometrycznej, istnieje wyraźna odpowiedniość między poziomami energetycznymi otrzymanymi przy użyciu ścisłych metod mechaniki kwantowej oraz warunków Bohra-Sommerfelda. Często są to niemal te same wzory, różniące się drobnymi szczegółami, jak np. stałe wkłady.

Model deformacji jednorodnych, zarówno w przypadku klasycznym jak i kwantowym, jest jedynie uproszczeniem. Tym niemniej dla płaskich cząsteczek trójatomowych

i przestrzennych czteroatomowych jest on ścisły, przy czym uważamy go za niezależny względem zagadnień związanych z innymi stopniami swobody układu, np. elektronowymi. W każdym razie rozważanie modelu tego rodzaju może umożliwić przynajmniej jakościowe badanie struktury poziomów energetycznych dla pewnych typów cząsteczek.

Bibliografia

- [1] E. A. Abbott, *Flatland. A Romance of many dimensions*, Seeley & Co., Ltd., London, 1884.
- [2] R. Abraham, J. E. Marsden, *Foundations of mechanics* (second ed.), The Benjamin-Cummings Publishing Company, London-Amsterdam-Sydney-Tokyo, 1978.
- [3] W. I. Arnold, *Metody matematyczne mechaniki klasycznej*, PWN, Warszawa, 1981.
- [4] J. Baumgarte, E. Kröner, *3n-dimensional mechanics of generalized continua*, in: Applied Mechanics, Proceedings of the Twelfth International Congress of Applied Mechanics, Stanford University, 1968, M. Hetenyi, W. G. Vincenti (eds) Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 1969.
- [5] O. I. Bogoyavlensky, *Prikladnaja matematika i mekhanika* **40**, nr. 2, 1976, 270.
- [6] O. I. Bogoyavlensky, *Methods of qualitative theory of dynamical systems in astrophysics and gas dynamics*, Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 1985.
- [7] M. Born, *Vorlesungen über Atommechanik*, Springer, Berlin, 1925.
- [8] A. Bohr, B. A. Mottelson, *Nuclear structure. Volume II*, W. A. Benjamin, Reading, Mass., 1975.
- [9] F. W. Byron, R. W. Fuller, *Matematyka w fizyce klasycznej i kwantowej. Tom I*, PWN, Warszawa, 1973.
- [10] S. Chandrasekhar, *Ellipsoidal figures of equilibrium*, Yale Univ. Press, New Haven-London, 1969.
- [11] H. Cohen, M. G. Muncaster, *The theory of pseudo-rigid bodies*, Springer-Verlag, New York, 1988.
- [12] H. Cohen, Q.-X. Sun, *Plane motions of elastic pseudo-rigid pendulums*, *Sol. Mech. Arch.* **13**, 1988, 147–176.

-
- [13] H. Cohen, G. P. Mac Sithigh, *Symmetry and asymmetry roto-deformations of a symmetrical, isotropic, elastic pseudo-rigid body*, Int. J. Nonlinear Mech. **27**, 1992, 519–526.
- [14] J. M. Eisenberg, W. Greiner *Nuclear theory Vol.1 Nuclear models*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam-London, 1970.
- [15] A. C. Eringen, *Nonlinear theory of continuous media*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1962.
- [16] A. C. Eringen, *Mechanics of micromorphic continua*, in: Proceedings of the IUTAM Symposium on Mechanics of Generalized Continua, Freudenstadt and Stuttgart, 1967, editor: E. Kröner, vol. **18**, Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 1968, 18–33.
- [17] A. C. Eringen (ed.), *Continuum mechanics. Volume I. Mathematics*, Academic Press, New York-London, 1975.
- [18] A. C. Eringen (ed.), *Continuum mechanics. Volume II. Continuum mechanics of single-substance bodies*, Academic Press, New York-San Francisco-London, 1975.
- [19] H. Goldstein, *Classical mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass, 1950.
- [20] B. Gołubowska, *Action-angle analysis of some geometric models of internal degrees of freedom*, J. of Nonlinear Math. Phys. **11**, 2004, Supplement, 138–144.
- [21] R. Gutowski, *Mechanika analityczna*, PWN, Warszawa, 1971.
- [22] F. W. Hehl, *On hypermomentum in general relativity. I. The notion of hypermomentum*, Zeitschrift für Naturforschung **31a**, 1976.
- [23] F. W. Hehl, E. A. Lord, Y. Ne’eman, *Hadron dilatation, shear and spin as components of the intrinsic hypermomentum. Current and metric-affine theory of gravitation*, Physics Letters **71B**, 1977, 432.
- [24] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Mechanika ośrodków ciągłych*, PWN, Warszawa, 1958.
- [25] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Mechanika kwantowa. Teoria nierelatywistyczna*, PWN, Warszawa, 1958.
- [26] A. I. Lurie, *Analiticheskaja mekhanika*, Moskwa, 1971.
- [27] G. W. Mackey, *The mathematical foundations of quantum mechanics*, W. A. Benjamin Inc., New York, Amsterdam, 1963.
- [28] J. E. Marsden, T. Ratiu, *Introduction to mechanics and symmetry*, Springer, New York, 1994.
- [29] A. Martens, *Dynamics of holonomically constrained affinely-rigid body*, Reports on Mathematical Physics **49**, no. 2/3, 2002, 295–303.
- [30] A. Martens, *Quantization of affinely-rigid body with constraints*, Reports on Mathematical Physics **51**, no. 2/3, 2003, 287–295.

-
- [31] [A. Martens](#), *Hamiltonian dynamics of planar affinely-rigid body*, Journal of Nonlinear Mathematical Physics, vol. **11**, Supplement, 2004, 145–150.
- [32] [A. Martens](#), *Quantization of the planar affinely-rigid body*, Journal of Nonlinear Mathematical Physics, vol. **11**, Supplement, 2004, 151–156.
- [33] P. Nardinocchi, L. Teresi, A. Tiero, *A direct theory of affine bodies*, Int. J. Eng. Sci. **38**, 2000, 865–878.
- [34] P. Papadopoulos, *On a class of higher-order pseudo-rigid bodies*, Math. Mech. Solids **6**, 2001, 631–640.
- [35] M. Roberts, C. Wulff, J. Lamb, *Hamiltonian systems near relative equilibria*, J. of Diff. Equations **179**, 2002, 562–604.
- [36] G. Rosensteel, J. Troupe, *Nonlinear collective nuclear motion*, preprint, arXiv:nucl-th/9801040 v1.
- [37] M. B. Rubin, *On the theory of a cosserat point and its application to the numerical solution of continuum problems*, ASME J. Appl. Mech. **52**, 1985, 368–372.
- [38] W. Rubinowicz, W. Królikowski, *Mechanika teoretyczna*, PWN, Warszawa, 1955.
- [39] W. Rubinowicz, *Kwantowa teoria atomu*, PWN, Warszawa, 1957.
- [40] W. Rubinowicz, *Sommerfeldsche Polynommethode*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, PWN, Warszawa, 1972.
- [41] J. J. Sławianowski, *Mechanika analityczna deformacji jednorodnych*, Prace IPPT, nr. 8, Warszawa, 1973.
- [42] J. J. Sławianowski, *Analytical mechanics of finite homogeneous strains*, Archives of Mechanics **26**, no. 4, 1974, 569–587.
- [43] J. J. Sławianowski, *Newtonian dynamics of polynomial deformations*, Bulletin de l'Académie Polonaise des Sciences, Série des sciences techniques **23**, no. 1, 1975, 17–22.
- [44] J. J. Sławianowski, *The mechanics of an affinely-rigid body*, International Journal of Theoretical Physics **12**, no. 4, 1975, 271–296.
- [45] J. J. Sławianowski, *Newtonian dynamics of homogeneous strains*, Archives of Mechanics **27**, no. 1, 1975, 93–102.
- [46] J. J. Sławianowski, *Geometria przestrzeni fazowych*, PWN, Warszawa, 1975.
- [47] J. J. Sławianowski, J. Słonimski, *Quantized Bertrand systems on $SO(3, \mathbb{R})$ and $SU(2)$* , Bulletin de l'Académie Polonaise des Sciences, Série des sciences physiques **28**, no. 2, 1980, 99–108.
- [48] J. J. Sławianowski, *Mechanika analityczna ciał odkształcalnych*, PWN, Warszawa-Poznań, 1982.

-
- [49] J. J. Sławianowski, *The mechanics of the homogeneously-deformable body. Dynamical models with high symmetries*, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* **62**, 1982, 229–240.
- [50] J. J. Sławianowski, *Affinely-rigid body and Hamiltonian systems on $GL(n, \mathbb{R})$* , *Reports on Mathematical Physics* **26**, no. 1, 1988, 73–119.
- [51] J. J. Sławianowski, *Space-time as a micromorphic continuum*, *Int. J. of Theor. Phys.* **29**, no. 11, 1990, 1177–1184.
- [52] A. K. Sławianowska, J. J. Sławianowski, *Quantization of affinely rigid body in n dimensions*, *Rep. on Math. Phys.* **29**, no. 3, 1991, 297–320.
- [53] J. J. Sławianowski, *Geometry of phase spaces*, John Wiley & Sons, Chichester-New York-Brisbane-Toronto-Singapore, 1991.
- [54] J. J. Sławianowski, *Nonlinear vibrations of rigid bodies. Projective correspondence between rigid body and material point mechanics*, in: *Proceedings of the 2nd Polish-German Workshop on Dynamical Problems in Mechanical Systems*, March 10–17, 1991, in Paderborn, eds: R. Bogacz, J. Lücker, and K. Popp, IFTR Editions, Warsaw, 1991, 25–34.
- [55] J. J. Sławianowski, A. K. Sławianowska, *Virial coefficients, collective models and problems with the Galerkin procedure*, *Archives of Mechanics* **45**, no. 3, 1993, 305–331.
- [56] J. J. Sławianowski, A. K. Sławianowska, *Hamiltonian systems on linear groups and one-dimensional lattices with internal parameters*, *Machine Dynamics Problems* **20**, 1998, 263–273.
- [57] J. J. Sławianowski, *Bertrand systems on spaces of constant sectional curvature. The action-angle analysis*, *Reports on Mathematical Physics* **46**, no. 3, 2000, 429–460.
- [58] J. J. Sławianowski, *Internal symmetries of geometrodynamical models*, *Rep. on Math. Phys.* **48**, no. 1/2, 2001, 103–114.
- [59] J. J. Sławianowski, *Group-theoretic approach to internal and collective degrees of freedom in mechanics and field theory*, *Technische Mechanik* **22**, no. 1, 2002, 8–13.
- [60] J. J. Sławianowski, *Quantum and classical models based on $GL(n, \mathbb{R})$ -symmetry*, in: *Proceedings of the Second International Symposium on Quantum Theory and Symmetries*, Kraków, Poland, July 18-21, 2001, editors: E. Kapuścik and A. Horzela, World Scientific, New Jersey-London-Singapore-Hong Kong, 2002, 582–588.
- [61] J. J. Sławianowski, *Linear frames in manifolds, Riemannian structures and description of internal degrees of freedom*, *Rep. on Math. Phys.* **51**, no. 2/3, 2003, 345–369.

-
- [62] J. J. Sławianowski, V. Kovalchuk, *Invariant geodetic problems on the affine group and related Hamiltonian systems*, Reports on Mathematical Physics **51**, no. 2/3, 2003, 371–379.
- [63] J. J. Sławianowski, *Classical and quantum collective dynamics of deformable objects. Symmetry and integrability problems*, in: Proceedings of the Fifth International Conference on Geometry, Integrability and Quantization, June 5-12, 2003, Varna, Bulgaria, editors: Ivaïlo M. Mladenov and Allen C. Hirshfeld, SOFTEX, Sofia, 2004, 81–108.
- [64] J. J. Sławianowski, *Geodetic systems on linear and affine groups. Classics and quantization*, J. of Nonlinear Math. Phys. **11**, 2004, Supplement, 130–137.
- [65] J. J. Sławianowski, V. Kovalchuk, *Classical and quantized affine physics. A step towards it*, J. of Nonlinear Math. Phys. **11**, 2004, Supplement, 157–166.
- [66] J. J. Sławianowski, V. Kovalchuk, A. Sławianowska, B. Gołubowska, A. Martens, E. E. Rożko, Z. J. Zawistowski, *Invariant geodetic systems on Lie groups and affine models of internal and collective degrees of freedom*, Prace IPPT, no. 7, Warszawa, 2004.
- [67] J. J. Sławianowski, V. Kovalchuk, A. Sławianowska, B. Gołubowska, A. Martens, E. E. Rożko, Z. J. Zawistowski, *Affine symmetry in mechanics of collective and internal modes. Part I. Classical models*, Reports on Mathematical Physics, vol. **54**, no. 3, 2004, 373–427.
- [68] J. J. Sławianowski, V. Kovalchuk, A. Sławianowska, B. Gołubowska, A. Martens, E. E. Rożko, Z. J. Zawistowski, *Affine symmetry in mechanics of collective and internal modes. Part II. Quantum models*, Reports on Mathematical Physics, vol. **55**, no. 1, 2005, 1–45.
- [69] W. I. Smirnow, *Matematyka wyższa. Tom III*, PWN, Warszawa, 1965.
- [70] J. M. Solberg, P. Papadopoulos, *A simple finite element-based framework for the analysis of elastic pseudo-rigid bodies*, Int. J. Numer. Meth. Eng. **45**, 1999, 1297–1314.
- [71] J. M. Solberg, P. Papadopoulos, *Impact of an elastic pseudo-rigid body on a rigid foundation*, Int. J. Eng. Sci. **38**, 2000, 589–603.
- [72] E. Sousa Dias, *A geometric Hamiltonian approach to the affine rigid body*, in: *Dynamics, bifurcation and symmetry. New trends and new tools*, P. Chossat (ed.), NATO ASI Series C, vol. **437**, Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 1994, 291–299.
- [73] J. L. Synge, *Geometrical mechanics and de Broglie waves*, Cambridge University Press, Cambridge, 1954.
- [74] J. L. Synge, *Classical dynamics*, Springer, Berlin, 1960.

-
- [75] C. Trimarco, *Microscopic variables and macroscopic quantities*, in: Proceedings of Workshop on Geometry, Continua and Microstructures, Paris, May 28–29, Hermann, Paris, 1997.
- [76] C. Truesdell, *The mechanical foundations of elasticity and fluid dynamics*, Gordon and Breach Science Publishers, Inc., New York-London-Paris, 1966.
- [77] A. Trzęsowski, J. J. Sławianowski, *Global invariance and Lie-algebraic description in the theory of dislocations*, Int. J. of Theor. Phys. **29**, no. 11, 1990, 1239–1249.
- [78] A. Wawrzyńczyk, *Group representations and special functions*, PWN, Warszawa, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht-Boston-Lancaster, 1984.
- [79] Z. Wesołowski, *Zagadnienia dynamiczne nieliniowej teorii sprężystości*, PWN, Warszawa, 1974.
- [80] K. Westpfahl, Annalen der Physik, **20**, 1967, 113.
- [81] H. Weyl, *The theory of groups and quantum mechanics*, Dover, New York, 1931.
- [82] Cz. Woźniak, *Mechanika ośrodków ciągłych*, w: *Mechanika techniczna. Tom I*, PWN, Warszawa, 1985.
- [83] Cz. Woźniak, *Więzy w mechanice ciał odkształcalnych*, Zakład Narodowy im. Ossolińskich, Wydawnictwo PAN, Wrocław - Warszawa - Kraków - Gdańsk - Łódź, 1988.
- [84] Cz. Woźniak, *Mechanics of continuous media*, in: *Foundations of mechanics*, PWN, Warszawa, Elsevier: Amsterdam - Oxford - New York - Tokyo, 1992.
- [85] C. Wulff, M. Roberts, *Hamiltonian systems near relative periodic orbits*, SIAM Journal of Dynamical Systems **1**, no. 1, 2002, 1–43.
- [86] D. P. Zhelobenko, *Compact Lie groups and their representations*, Translations of Mathematical Monographs **40**, AMS, 1978.