CAOS E SIMETRIAS EM SISTEMAS QUÂNTICOS

ASSIS FRANCISCO MORO RIGHI

DISSERTAÇÃO
Submetida ao Curso de Pós-Graduação em Físico-Química
da Universidade Federal de Santa Catarina
para obtenção de grau de

MESTRE EM CIÊNCIAS

UFSC
Florianópolis, dezembro de 1989

CAOS E SIMETRIAS EM SISTEMAS QUÂNTICOS

Assis Francisco Moro Righi

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do grau de

MESTRE EM CIÊNCIAS

Especialização Físico-Química e aprovada em sua forma final pelo Curso de Pós-Graduação em Físico-Química da UFSC

Prof. Dr. Jason A.C. Gallas
Orientador

Prof. Dr. Ademir Neves
Coordenador

Banca examinadora:

Prof. Dr. Fernando Cabral, UFSC,

Prof. Dr. Carlos Alberto Kuhnen, UFSC,

Prof. Dr. Alexandre Lago, UFSC,

Prof. Dr. Jason A.C. Gallas, UFSC.

Resumo.

Neste trabalho são investigadas algumas propriedades espectrais de dois sistemas quânticos não separáveis: o hamiltoniano de Henon-Heiles e o oscilador harmônico bidimensional com perturbação sugerida por Pullen e Edmonds do tipo x^2y^2. Foi confirmado que estes sistemas apresentam uma transição do comportamento quântico regular para o comportamento quântico irregular, também chamado caótico, através do estudo da sensibilidade dos níveis a pequenas mudanças na perturbação. Estes resultados foram obtidos com melhor precisão do que os já publicados na literatura.

Tanto na obtenção do espectro de energias quanto na própria análise da sensibilidade, a utilização dos grupos de simetrias destes sistemas quânticos foi muito importante. Assim, este trabalho também contém um estudo detalhado das simetrias de sistemas quânticos em geral e sua aplicação no estudo dos hamiltonianos citados.

Abstract.

We investigated spectral properties of two nonseparable quantum systems: the Henon-Heiles model and a two-dimensional harmonic oscillator perturbed by a x^2y^2 term, as suggested by Pullen and Edmonds. We confirmed the ocurrence of a transition from regular to irregular behaviour in both systems from a careful investigation of sensitivity of the energy spectra upon changes in the perturbation. Our results are the most accurate obtained so far for these systems.

The calculation and analysis of the sensitivity was strongly facilited by use of the symmetry group of the systems. For this reason, the present work also contains a detailed study of the symmetries of quantum systems in general and of the aforementioned systems in particular.

Índice

1. Introdução.

1.1 Conceito qualitativo clássico de caos.

O conceito de caos está diretamente ligado ao conceito de integrabilidade. Um sistema dinâmico clássico conservativo com f graus de liberdade é integrável se existem f constantes de movimento (incluindo o hamiltoniano) expressas como função das coordenadas do espaço de fase de dimensão $2f$. Um sistema com equações de movimento que são completamente separáveis é um caso particular de sistema integrável[1,2].

Em sistemas ligados descritos por hamiltonianos quase separáveis (hamiltonianos não separáveis devido a perturbações muito pequenas) o espaço de fase apresenta regiões distintas. As região regulares do espaço de fase contém trajetórias que comportam-se muito igual àquelas dos sistemas separáveis[3]. Após a aplicação de uma fraca perturbação essas trajetórias permanecem nas vizinhanças da trajetória inicial. Além disso, essas trajetórias estão contidas em superfícies bem definidas de dimensão f (torus).

As regiões irregulares ou caóticas contém trajetórias que divergem rapidamente de sua trajetória original após a aplicação de uma pequena perturbação, ou seja, são bastante instáveis em relação a mudanças nas condições iniciais. Sistemas ergódicos (ou estocásticos) representam o caso extremo de não-integrabilidade, isto é, contém somente regiões irregulares e quase todas as trajetórias exploram a vizinhança de cada ponto numa superfície de energia de dimensão $(2f-1)$ no espaço de fase.

1.2. Caos em sistemas quânticos.

O grande interesse em sistemas clássicos cujos hamiltonianos não são integráveis originou a questão de como ergodicidade se manifesta no sistema quântico correspondente (ver Zaslavskii, G M, Sov. Phys. Usp, 22, 788 (1979) para uma análize detalhada). Despresando-se os spins e outros efeitos relativísticos, o operador hamiltoniano quântico é facilmente obtido da expressão clássica da energia $H(q_i,p_i)$ fazendo a substituição de p_i por $-i\hbar d/dq_i$ ou requerendo que p_i e q_i satisfaçam as conhecidas relações de comutação. Nos fenômenos de baixa energia os efeitos de spin podem ser introduzidos pelo tratamento padrão das matrizes de Pauli sem recorrer à equação de Dirac.

Percival [3] iniciou o estudo de caos em sistemas quânticos em 1973 motivado pela observação que moléculas poliatômicas são descritas por hamiltonianos não integráveis. Ele previu que o espectro de energia vibracional de moléculas poliatômicas deve mostrar uma sequência regular de níveis que modifica-se abruptamente antes do limite de dissociação numa sequência irregular e que somente os Lasers modernos tem suficiente resolução para detectar o espectro irregular. As investigações posteriores ficaram restritas a estudos numéricos de hamiltonianos modelo como "Sinai's billiard" e osciladores com acoplamentos cúbicos, quárticos ou de maior ordem que tiveram origem em problemas de mecânica clássica ou foram convenientemente sugeridos.

Vários métodos foram sugeridos para caracterizar o caos em sistemas quânticos: a distribuição estatística do espaçamento dos níveis de energia, a sensibilidade dos níveis a uma pequena mudança na perturbação, os cruzamentos evitados. Devido a sua natureza invariante (ou independência em relação a base) as propriedades espectrais se tornaram adequadas para analisar o impacto do movimento caótico na mecânica quântica. Entretanto, o caos quântico também pode ser estudado usando informações contidas nas autofuções [4,5].

1.2.1. Sensibilidade dos níveis a mudanças da perturbação e os cruzamentos evitados.

Num trabalho pioneiro, Percival [3] previu que o espectro quântico de energias de hamiltonianos não integráveis consiste de duas partes com propriedades muito diferentes: uma parte regular e uma irregular. As energias do espectro irregular são muito mais sensíveis a uma pequena mudança na perturbação do que as da parte regular.

Para um hamiltoniano dependente de um parâmetro b, Pomphrey [6] sugeriu, em 1974, as segundas diferenças

$$\Delta^2 E_i = [E_i(b+\delta b) - E_i(b)] - [E_i(b) - E_i(b-\delta b)], \tag{1.1}$$

como critério para medir o comportamento de cada nível energético E_i em relação a uma pequena modificação δb no parâmetro de perturbação b do hamiltoniano considerado. Quanto maior a segunda diferença maior a sensibilidade dos autovalores. Um estudo numérico do Hamiltoniano de Henon-Heiles (em unidades com $m = \hbar = 1$):

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{\omega}{2}(x^2 + y^2) + bx(y^2 - x^2/3) \tag{1.2}$$

com $b = 0.088$ e $\omega = 3^{-1/2}$ mostrou que autovalores com energia menor que uma certa energia crítica quântica E_{cq} são insensíveis a pequenas mudanças na perturbação, ou seja, pertencem a parte regular do espectro. Acima de E_{cq} encontrou autovalores que são muito sensíveis a pequenas mudanças na perturbação, ou seja, pertencem a parte irregular do espectro.

Estudando esse mesmo hamiltoniano com $b = 0.1118$ e $\omega = 1$, Noid e outros [7] sugeriram em 1980 um novo conceito de ergodicidade quântica associado com a justaposição de cruzamentos evitados no gráfico dos autovalores em função do parâmetro de perturbação. Pouco tempo depois, em 1981, Pullen e Edmonds [8] mostraram usando $b = 0.088$ e $\omega = 1$ que a maioria das grandes segundas diferenças corresponde a cruzamentos evitados. O hamiltoniano de Henon-Heiles tem apenas um número finito de estados discretos. Pode-se ver facilmente que o potencial deste hamiltoniano tem três pontos de sela [9]: $(1/b, 0)$ e $(-1/2b, \pm\sqrt{3}/2b)$ com energia $D = 1/6b^2$. Esta energia corresponde a energia de dissociação acima da qual não existem estados quânticos discretos ou ligados. Posteriormente, Pullen e Edmonds [10] estudaram o hamiltoniano (em umidades com $m = \hbar = 1$):

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + x^2 + y^2) + bx^2y^2 \tag{1.3}$$

que tem a característica de ter todos os estados ligados: não ocorre dissociação como no modelo de Henon-Heiles. Utilizando todas as simetrias unidimensionais do operador da equação (2.3) eles calcularam as segundas diferenças no intervalo de energias que o sistema clássico tem a transição de ordem para caos. Obtiveram um crescente aumento do número de grandes segundas diferenças com o aumento da energia, ou seja, o sistema quântico mostrou uma transição da região regular para a irregular do espectro. A utilização das simetrias no estudo dos cruzamentos evitados é importamte porque, além de simplificar bastante a solução numérica, evita a possibilidade de cruzamento entre os níveis. Isso é consequência do teorema de von Neumann e Wigner (1929), Teller (1937) e Arnol'd (1978) [8,10] que proíbe o cruzamento de níveis de mesma simetria para um sistema hamiltoniano de um parâmetro.

1.2.2 Distribuição de probabilidade do espaçamento dos níveis.

Em estudos de Berry [1], McDonald-Kaufman [11] e Bohigas e outros [12] foram investigadas as propriedades espectrais de sistemas ergódicos clássicos como "Sinai's billiard" e "Stadium billiard". Ficou estabelecido que as propriedades estatísticas dos níveis de energia desses sistemas são as mesmas dos ensembles de matrizes reais simétricas cujos elementos tem distribuição gaussiana, que são conhecidos como ensembles ortogonais de Gauss (GOE). Nesses sistemas a distribuição de probabilidade $P(S)$ de espaçamento dos níveis num intervalo E a $E+\delta E$ é bem aproximada pela distribuição de Wigner, ou seja:

$$P(S) = \frac{\pi}{2}g^2 S \exp(-\frac{\pi}{4}g^2 S^2) \tag{1.4}$$

onde S é o espaçamento dos níveis em unidades de espaçamento médio e g, a densidade média dos níveis na superfície de energia E, é dada por:

$$g = (2\pi\hbar)^{-f}\int dq_1 \ldots dq_f \int dp_1 \ldots dp_f \delta(E - H(q_1 \ldots p_f)) \tag{1.5}$$

e H é o hamiltoniano do sistema com f graus de liberdade. Como (1.4) se anula para $S=0$, estão excluidas as possibilidades de cruzamento dos níveis. Isso caracteriza a propriedade espectral de repulsão dos níveis, ou seja, a tendência dos níveis de evitarem agrupamento no regime ergódico.

Os resultados anteriores são válidos somente para sistemas ergódicos, em que o espaço de fase é totalmente ocupado por trajetórias caóticas. Nos sistemas integráveis, ao contrário, não existe nenhum caos e a distribuição de probabilidade de espaçamento dos níveis é de Poisson [2], ou seja:

$$P(S) = g\exp(-gS) \tag{1.6}$$

Essa distribuição é valida para sistemascom dois ou mais graus de liberdade. É interessante obeservar que (1.6) tem seu máximo para $S=0$, o que corresponde a possibilidade de existirem muitos cruzamentos entre níveis de energia.

Os sistemas genéricos não são nem integráveis nem ergódicos: seu espaço de fase é parcialmente regular e parcialmente caótico e as estatísticas de níveis devem ser intermediárias entre as integráveis e as ergódicas. A diagonalização de alguns desses sistemas mostrou que quando o potencial é modificado do caso integrável (regular) para o ergódico, a função de distribuição $P(S)$ começa do tipo de Poisson e é alterada gradualmente terminando do tipo de Wigner.

Berry e Robnik [13] obtiveram uma previsão teórica para $P(S)$ igual a superposição da estatística de Poisson e várias estatísticas de Wigner para a região de transição entre o estado regular e o caótico. Foi fundamental no seu estudo a idéia de que cada região clássica conectada regular ou irregular (caótica) do espaço de fase num intervalo δE dá origem a uma sequência regular de níveis energéticos, com $P(S)$ do tipo da equação (1.6), ou irregular, com $P(S)$ do tipo da equação (1.4). As diferentes regiões clássicas podem ser determinadas calculando-se os expoentes de Liapunov ou as seções de Poincaré [14]. Considerando separadamente as seqüências de níveis que são estatisticamente independentes, a distribuição calculada foi:

$$P(S) = \frac{1}{g}\frac{d^2}{dS^2}\left[\exp^{-g_1 S}\Pi_{i=2}^{N} erfc(\frac{\pi^{1/2}}{2}g_i S)\right] \tag{1.7}$$

onde g_1 é a soma das densidades médias de todas as regiões regulares e g_i, $i = \{2,\ldots,N\}$ são as densidades médias das $(N-1)$ regiões caóticas do espaço de fase e $g = \sum g_i$.

1.3. Objetivos.

A motivação básica desta dissertação é a possibilidade de se estudar experimentalmente questões relacionadas com caos quântico no domínio da física atômica. Em vez de estudos teóricos como billiards e modelos polinomiais pode-se agora estudar diretamente um dos problemas fundamentais da física teórica: o efeito Zeeman quadrático em átomos de Rydberg [15-17]. No estudo das propriedades espectrais é necessário a diagonalização de matrizes hamiltonianas de ordem muito elevada. As técnicas de armazenamento de matrizes e as simetrias do operador hamiltoniano, apenas descritas em termos gerais na literatura, são indispensáveis para um estudo satisfatório desses sistemas quânticos. Assim, um dos objetivos básicos desta dissertação é desenvolver o conhecimento de técnicas que permitem estudar sistemas físicos reais. Um motivo adicional é um estudo de Reichl e Buttner [18] de 1987 que mostrou que a quebra de simetria modifica drasticamente as propriedades de distribuição do espaçamento dos níveis e de flutuações do sistema quântico, mudanças que não têm análogo no sistema clássico correspondente.

Como os estudos recentes sobre quebra de simetria em sistemas quânticos [18] são numéricos e se limitam a um único hamiltoniano modelo (com um potencial totalmente ligado sugerido por Pullen e Edmonds [10]), um dos objetivos deste trabalho é o estudo das simetrias de sistemas quânticos e suas implicações no estudo de hamiltonianos não integráveis. Estudos desse tipo num sistema físico real como o átomo de hidrogenio em um campo magnético uniforme ainda não foram feitos.

Nos trabalhos numéricos de Seligman, Verbaarschot e Zirnbauer [19], Seligman e Verbaarschot [20], Wintgen e Friedrich [21] e Caurier e Grammaticos [22] observa-se controvérsias em relação às predições teóricas feitas por Berry e Robnik [23] para sistemas que têm uma transição de ordem para caos. Assim, outro objetivo é caracterizar as propriedades espectrais de sistemas quânticos quando o sistema clássico correspondente tem uma transição de ordem para caos.

1.4. Organização do trabalho.

Este capítulo deu uma breve noção de sistemas caóticos clássicos que foram fundamentais para o início do estudo de caos nos sistemas quânticos correspondentes. Foram mostrados os resultados já obtidos em relação a sensibilidade a pequenas mudanças na perturbação, cruzamentos evitados e distribuição de probabilidade de espaçamento dos níveis dos hamiltonianos não integráveis. Também foi questionado a possibilidade de estudos em sistemas físicos reais que admitem experimentos para a verificação dos resultados. Finalmente, a constatação de lacunas e controvérsias na literatura centralizou este trabalho no estudo das simetrias e das propriedades espectrais de hamiltonianos não integráveis.

O capítulo 2 analisa as características das operações de simetria na equação de Schrödinger independente do tempo e revisa resultados muito importantes a partir do grupo gerado por esses operadores (grupo da equação de Schrödinger). Também discute um método aproximado simples para calcular os níveis de energia de hamiltonianos não integráveis (método variacional).

O capítulo 3 contém a aplicação dos principais resultados teóricos apresentados no capítulo 2 para a obtenção dos níveis de energia de dois sistemas não integráveis: o hamiltoniano de Henon-Heiles e o hamiltoniano com potencial totalmente ligado sugerido por Pullen e Edmonds. Também são investigadas as propriedades espectrais desses sistemas na região de transição de ordem para caos do sistema clássico correspondente, especialmente as relacionadas à sensibillidade a pequenas mudanças na perturbação e aos cruzamentos evitados dos níveis de mesma simetria.

Neste trabalho se investiga detalhadamente a melhor base para o cálculo dos autovalores do hamiltoniano de Henon-Heiles que são necessários ao estudo do comportamento caótico do mesmo hamiltoniano. Como este sistema apresenta dissociação a partir de determinada energia, a base não pode ser aumentada arbitrariamente. No entanto, os trabalhos publicados discutem muito pouco sobre as dimensões utilizadas. No hamiltoniano sugerido por Pullen e Edmonds [10] também se utiliza bases com maior dimensão a fim de obter resultados com maior precisão.

2. Revisão da literatura.

2.1 Simetrias dos hamiltonianos.

Para a obtenção de um número muito grande de níveis de energia convergidos é necessário a diagonalização de matrizes de ordem muito elevada (mais do que 4000x4000). A utilização das simetrias do operador hamiltoniano permite dividir a matriz hamiltoniana em submatrizes reduzindo o tempo e a quantidade de memória do computador necessários à diagonalização. Seu uso também tem sido indispensável em estudos recentes sobre quebra de simetrias em sistemas quânticos [18].

2.1.1. As operações de simetria.

Os autovalores E_n necessários ao estudo do comportamento quântico dos sistemas mencionados anteriormente (hamiltonianos quase separáveis) são obtidos da equação de Schrödinger independente do tempo, ou seja:

$$H\Psi_n = E_n\Psi_n \qquad (2.1),$$

onde Ψ_n é o autoestado associado ao autovalor E_n e H é o operador hamiltoniano.

O operador hamiltoniano tem simetria se é invariante (fica o mesmo) após uma transformação de coordenadas como reflexão, rotação, permutação ou inversão. Uma transformação de coordenadas R do sistema original $\vec{x}$ para um sistema $\vec{x}'$, tem a forma:

$$\vec{x}' = \mathrm{R}\vec{x},$$

ou, em função de suas componentes,

$$x_i' = \sum_j R_{ij}x_j.$$

Um operador de transformação P_R que atua em uma função $f(\vec{x})$ ao invés das coordenadas é definido de acordo com a convenção de Wigner por:

$$P_R f(\vec{x}) = f(R^{-1}\vec{x}),$$

Qualquer operador que deixa o hamiltoniano invariante é denominado operador de simetria.

Quando um operador de transformação P_R deixa H invariante é indiferente se ele aparece na esquerda ou direita deste:

$$P_R H\Psi = HP_R\Psi \qquad (2.2)$$

para qualquer Ψ. Portanto, P_R comuta com H. Nessa equação pode-se expandir o produto dos operadores numa representação matricial baseada em autofunções do operador P_R:

$$\sum_j (P_R)_{ij} H_{jk} = \sum_j H_{ij} (P_R)_{jk}$$

Como na base de suas autofunções P_R é uma matriz diagonal a soma se reduz a só um termo:

$$(P_R)_{ii} H_{ik} = H_{ik} (P_R)_{kk}$$

ou

$$[(P_R)_{ii} - (P_R)_{kk}] H_{ik} = 0. \tag{2.3}$$

Claramente, H_{ik}=0 se i e k referem-se a diferentes autovalores do operador P_R. O significado desse resultado é que, na procura de autovetores que diagonalizam o operador H, pode-se usar separadamente classes de funções associadas a diferentes autovalores do operador de simetria [24].

O conjunto de todos os operadores que comutam com H forma um grupo (grupo da equação de Schrödinger) pois existe transformação inversa de coordenadas e o produto de dois operadores que deixam H invariante também deixa H invariante (o produto indica duas operações em sucessão). Em outras palavras, o produto de dois operadores que comutam com H também comuta com H.

Exemplos das operações de simetria que podem ocorrer são listados a seguir na notação padrão de Schoenflies que geralmente é utilizada em aplicações moleculares [24,26]:

E = identidade.

C_n = rotação de $2\pi/n$.

σ_h = reflexão num plano horizontal, isto é, num plano perpendicular ao eixo de maior simetria de rotação.

σ_v = reflexão num plano vertical (que contém o eixo de maior simetria).

σ_d = produto de uma rotação e uma reflexão num plano contendo o eixo de rotação.

S_n = rotação imprópria de $2\pi/n$, ou seja, rotação de $2\pi/n$ seguida de reflexão no plano perpendicular ao eixo da rotação. S_2 = inversão.

2.1.2. O grupo da equação de Schrödinger.

Como o conjunto de operadores P_R que comutam com H (que deixam H invariante) gera um grupo, é conveniente obter informações do hamiltoniano a partir desse grupo de operadores. Aplicando um operador de simetria genérico P_R (pertecente a um grupo de operadores $E, C_n, \sigma_h, \ldots$ definidos na seção anterior que comutam com H) na equação de Schrödinger, obtém-se:

$$P_R H \Psi_n = P_R E_n \Psi_n$$

ou

$$H P_R \Psi_n = E_n P_R \Psi_n \tag{2.4}$$

pois P_R comuta com H e também com E_n. Qualquer função $P_R\Psi_n$ obtida operando-se numa autofunção Ψ_n por um operador de simetria do grupo da equação de Schrödinger é autofunção dessa equação com a mesma energia que Ψ_n. Assim, aplicando o operador de simetria a uma autofunção gera-se outras autofunções degeneradas. Se esse procedimento fornece todas as funções degeneradas a degenerescência é normal. Qualquer degenerescência que não pode ser obtida desse modo é denominada acidental, significando que não tem origem óbvia em simetria [24].

Admitindo que um autovalor E_n é l_n vezes degenerado (excluindo as degenerescências acidentais) pode-se escolher um conjunto de l_n autofunções ortogonais $\Psi_i^{(n)}$ degeneradas de autovalor E_n que constituem uma base do espaço de dimensão l_n. A aplicação de um operador de simetria P_R em qualquer das l_n autofunções produz uma autofunção com a mesma energia que é combinação linear das l_n funções degeneradas. O efeito dessas operações P_R em qualquer função $\Psi_i^{(n)}$ é convenientemente representado por matrizes $\mathbf{D}^{(n)}(R)$ definidas formalmente por:

$$P_R\Psi_i^{(n)} = \sum_{k=1}^{l_n} \Psi_k^{(n)} D^{(n)}(R)_{ki} \tag{2.5}$$

Essas matrizes são irredutíveis (dimensão l_n) pois nenhuma matriz de dimensão menor que l_n pode expressar a transformação mais geral. Como cada matriz $\mathbf{D}^{(n)}(R)$ corresponde a um operador P_R do grupo da equação de Schrödinger então devem formar representações de dimensão l_n do mesmo grupo. Demonstra-se que essas matrizes formam uma representação do grupo considerando duas operações sucessivas (o índice n que denota uma representação de determinado estado E_n está omitido):

$$\begin{aligned} P_{SR}\Psi_i = P_S P_R \Psi_i &= P_S \sum_k \Psi_k D(R)_{ki} \\ &= \sum_k (P_S\Psi_k) D(R)_{ki} = \sum_{kj} \Psi_j D(S)_{jk} D(R)_{ki} \\ &= \sum_j \Psi_j [\mathbf{D}(S)\mathbf{D}(R)]_{ji} \end{aligned}$$

Mas:

$$P_{SR}\Psi_i = \sum_j \Psi_j D(SR)_{ji}$$

Então, $\mathbf{D}(SR) = \mathbf{D}(S)\mathbf{D}(R)$ e as matrizes de fato constituem uma representação do grupo. O conjunto de l_n autofunções degeneradas $\Psi_i^{(n)}$ de energia E_n forma, portanto, uma base de funções para a representação irredutível $\mathbf{D}_n$ (de dimensão l_n) do grupo da equação de Schrödinger. Diz-se que a função $\Psi_i^{(n)}$ pertence a i-ésima linha da n-ésima representação irredutível. Facilmente se demonstra que para uma base de funções ortonormal, a qual é geralmente usada em mecânica quântica e também neste trabalho, a representação é unitária [24].

Deve-se esperar que representações irredutíveis diferentes ocorram para autovalores diferentes. Considerando um conjunto diferente de funções linearmente independentes Ψ'_j que são combinações lineares da base Ψ_i, $i = \{1, \ldots, l\}$,

$$\Psi'_j = \sum_{k=1}^{l} \Psi_k \alpha_{kj}$$

$$\Psi_i = \sum_{m=1}^{l} \Psi'_m \alpha^{-1}_{mi}$$

$$\begin{aligned} P_R \Psi'_j &= P_R \sum_k \Psi_k \alpha_{kj} = \sum_{k,i} \Psi_i D(R)_{ik} \alpha_{ki} \\ &= \sum_{k,i,m} \psi'_m \alpha^{-1}_{mi} D(R)_{ik} \alpha_{kj} = \sum_m \Psi'_m [\alpha^{-1} \mathrm{D}(R) \alpha]_{mj} \\ &= \sum_m \Psi'_m D'(R)_{mj} \end{aligned}$$

$\mathrm{D}'(R) = \alpha^{-1}\mathrm{D}(R)\alpha$ é uma representação equivalente a $\mathrm{D}(R)$. Portanto, a representação do grupo da equação de Schrödinger, a qual pertence a um particular autovalor, é unicamente determinada a menos de uma transformação de similaridade. A representação irredutível é uma característica qualitativa pela qual os vários tipos de autovalores podem ser distinguidos.

2.1.3. Características das representações irredutíveis.

Nesta seção são apresentados alguns teoremas importantes sobre representações irredutíveis, que permitem generalizar o resultado da equação (2.3) para todo o grupo de operadores que comutam com o hamiltoniano.

Teorema 1- Teorema da grande ortogonalidade: para representações não equivalentes, irredutíveis e unitárias de um grupo vale a igualdade:

$$\sum_R D^{(n)}(R)^*_{ij} D^{(n')}(R)_{i'j'} = \frac{h}{l_n} \delta_{ii'} \delta_{jj'} \delta_{nn'} \tag{2.6}$$

onde a soma varia sobre todos os elementos do grupo $R = \{E, A_2, \ldots, A_h\}$ e l_n é a dimensão da n-ésima representação irredutível D_n [24,25].

É útil interpretar esse teorema geometricamente como estabelecendo a ortogonalidade de um conjunto de vetores caracterizados pelos índices n, i, j no espaço de dimensão h dos elementos do grupo $R = \{E, A_2, \ldots, A_h\}$. Para o índice n há l_n^2 vetores ortogonais independentes pois $i, j = \{1, \ldots, l_n\}$. O número total de vetores ortogonais é obtido somando-se todos os n, o qual não pode exceder a dimensão h do espaço. Facilmente se demostra [25] que vale a igualdade, ou seja:

$$\sum_n l_n^2 = h \tag{2.7}$$

Teorema 2: duas funções pertencentes a diferentes representações irredutíveis ou diferentes linhas da mesma representação unitária são ortogonais.
Prova: como o produto escalar é invariante a rotações :

$$\begin{aligned}(\Phi_k^{(n)}, \Psi_{k'}^{(n')}) &= (P_R\Phi_k^{(n)}, P_R\Psi_{k'}^{(n')}) \\ &= \sum_{ii'} D^{(n)}(R)_{ik}^{*} D^{(n')}(R)_{i'k'}(\Phi_i^{(n)}, \Psi_{i'}^{(n')})\end{aligned}$$

Na primeira igualdade, pode-se ver que há uma independência em relação a R. Somando o termo da direita sobre todos os elementos do grupo R, dividindo por h (ordem ou número de elementos do grupo) e aplicando o teorema da grande ortogonalidade, obtém-se:

$$(\Phi_k^{(n)}, \Psi_{k'}^{(n')}) = \delta_{nn'}\delta_{kk'} \sum_{i=1}^{l_n} l_n^{-1}(\Phi_i^{(n)}, \Psi_i^{(n)})$$

onde l_n é dimensão da n-ésima representação irredutível. Também se vê que o produto escalar $(\Phi_k^{(n)}, \Psi_{k'}^{(n')})$ é independente de k. Funções pertencentes a diferentes representações irredutíveis ou diferentes linhas da mesma representação unitária são denominadas funções de simetria diferente. Esse resultado pode ser generalizado pelo seguinte teorema.

Teorema 3 - elementos de matriz de um operador H que é invariante sobre todas as operações de um grupo anulam-se entre funções pertencentes a representações irredutíveis diferentes ou diferentes linhas da mesma representação unitária.
Prova: como H é invariante a todas as operações do grupo, ele pertence a representação identidade e, assim, não muda a simetria de $\Psi_k^{(n)}$ no produto $(\Psi_{k'}^{(n')}, H\Psi_k^{(n)})$, isto é, $H\Psi_k^{(n)}$ pertence a k-ésima linha da n-ésima representação irredutível e, pelo teorema anterior, não conecta funções pertencentes a diferentes representações irredutíveis ou diferentes linhas da mesma representação unitária, isto é, não conecta funções de simetria diferente. Esse resultado é muito importante porque permite diagonalizar separadamente cada uma das matrizes hamiltonianas geradas por estados de mesma simetria.

Como as transformações de similaridade ($R' = A^{-1}RA$) deixam um certo grau de arbitrariedade nas representações, é conveniente o uso do traço dessas matrizes. O caráter da n-ésima representação é o conjunto de h números $\chi^{(n)}(E)$, $\chi^{(n)}(A_2), \ldots, \chi^{(n)}(A_h)$, onde:

$$\chi^{(n)}(R) \equiv Tr\mathbf{D}^{(n)}(R) = \sum_{n=1}^{l_n} D^{(n)}(R)_{ii}. \tag{2.8}$$

Fazendo $i = j$, $i' = j'$ e somando em i e i', a equação (2.6) fica:

$$\sum_R \chi^{(n)}(R)^* \chi^{(n')}(R) = h\delta_{nn'}. \tag{2.9}$$

Reunindo os elementos do grupo em classes C_k, nas quais $\chi^{(n)}(R)$ são iguais, a equação anterior fica:

$$\sum_k \chi^{(n)}(C_k)^* \chi^{(n')}(C_k) N_k = h\delta_{nn'}$$

onde N_k é o número de elementos do grupo na classe C_k e k varia sobre todas as classes.

Desse modo, os caracteres das várias representações irredutíveis formam um sistema ortogonal de vetores no espaço de classes C_k. Como o número de vetores mutuamente ortogonais não pode exceder a dimensionalidade do espaço, o número de representações irredutíveis não pode exceder o número de classes. Aqui também vale a igualdade, ou seja, o número de representações irredutíveis é igual ao número de classes.

Tendo encontrado as simetrias do hamiltoniano (seção 2.1.1) obtém-se informações importantes na tabela de caracteres desse grupo de simetria, que se encontram publicadas na literatura. As linhas da tabela definem as representações irredutíveis do grupo e as colunas as classes. A primeira coluna corresponde ao elemento unitário E que é representado pela matriz identidade (seus caracteres indicam as dimensões das representações) e a representação da primeira linha, denominada totalmente simétrica ou invariante, têm todos os elementos iguais a unidade.

2.1.4. Autofunções de simetria.

Esta seção completa a teoria sobre simetrias pois mostra como obter as componentes simétricas de qualquer função, isto é, as componentes pertencentes a cada linha de cada representação irredutível de um grupo de simetria. Esse resultado necessário para a utilização do teorema 3 no estudo variacional de hamiltonianos perturbados porque primeiro deve-se decompor a função tentativa nas suas componentes simétricas para depois diagonalizar separadamente cada matriz hamiltoniana gerada por estados de mesma simetria. Na equação (2.5), vê-se que o resultado da aplicação de qualquer elemento do grupo em uma função base da i-ésima linha da n-ésima representação irredutível $\Psi_i^{(n)}$ é uma combinação linear de todas as funções base da mesma representação irredutível. Multiplicando essa equação por $D^{(m)}(R)^*$, somando sobre R e usando o teorema da grande ortogonalidade, obtém-se:

$$\sum_R D^{(m)}(R)^*_{ij} P_R \Psi_k^{(n)} = \frac{h}{l_n} \delta_{nm} \delta_{kj} \Psi_i^{(n)}. \qquad (2.10)$$

Conclui-se que a aplicação em um operador da forma:

$$P_{ij}^{(m)} = \frac{l_m}{h} \sum_R D^{(m)}(R)^*_{ij} P_R \qquad (2.11)$$

a uma função base tem a propriedade de fornecer zero, a menos que a função operada pertença à j-ésima linha de $D^{(m)}$. Se essas condições são satisfeitas, o resultado é $\Psi_i^{(m)}$. Portanto, tem-se um método para gerar todas as funções base de uma representação irredutível a partir de uma isolada.

O teorema a seguir diz que uma função arbitrária F pode ser decomposta na soma das funções $f_k^{(n)}$ pertencentes a cada linha (k) de cada representação irredutível (n) do grupo de operadores P_R.

Teorema 4: Se $D_1, D_2, \ldots, D_c$ são todas as diferentes representações irredutíveis de P_R, vale a igualdade:

$$F = \sum_{n=1}^{c} \sum_{k=1}^{l_n} f_k^{(n)}.$$

A dedução, embora simples[24,25], está omitida devido a extensão.

Nas equações (2.10) e (2.11) viu-se que:

$$P_{kk}^{(n)} f_{k'}^{(n')} = \delta_{n'n} \delta_{k'k} f_k^{(n)}$$

e, então:

$$P_{kk}^{(n)} F = f_k^{(n)} \tag{2.12}$$

na qual se nota que $P_{kk}^{(n)}$ é um operador de projeção que fornece a parte pertencente a k-ésima linha da n-ésima representação irredutível de qualquer função. Esse resultado é diretamente utilizado no capítulo seguinte. Colocando $i = j$ na equação (2.11) e somando sobre todos i, é possível definir um novo operador:

$$P^{(n)} \equiv \sum_i P_{ii}^{(n)} = \frac{l_n}{h} \sum_R \chi^{(n)}(R)^* P_R \tag{2.13}$$

que para uma função $f^{(n)}$, expressa na soma de funções pertencentes às linhas da n-ésima representação, satisfaz $P^{(n)}.f^{(n)} = f^{(n)}$ e também:

$$P^{(n)} F = f^{(n)}, \tag{2.14}$$

cujo resultado é bastante utilizado no capítulo seguinte pois projeta a parte pertencente a n-ésima representação irredutível de qualquer função dependendo somente do caráter dessa representação que se encontra publicado em tabelas de várias bibliografias [24,26].

2.2. Espectro variacional.

Os níveis de energia dos hamiltonianos não podem ser obtidos analíticamente se a equação de Schrödinger não é separável. O método variacional é um método aproximado simples para a obtenção dos estados fundamental e excitados [27].

Uma função arbitrária normalizada Ψ pode ser expandida nas autofunções de energia u_E, onde $Hu_E = Eu_E$.

$$\Psi = \sum_E A_E u_E \tag{2.15}$$

O valor esperado de H para a função Ψ é dado por:

$$\langle H\rangle = \int \Psi^* H \Psi d\tau = \sum_E E(A_E)^2, \tag{2.16}$$

onde a integração é estendida sobre todo o domínio das coordenadas do sistema.

Uma inequação útil é derivada da equação (2.16) trocando cada autovalor E pelo menor autovalor E_0:

$$\langle H\rangle \geq \sum_E E_0(A_E)^2 = E_0,$$

visto que $\sum_E (A_E)^2 = 1$ para uma função normalizada. Assim:

$$E_0 \leq \int \Psi^* H \Psi d\tau. \tag{2.17}$$

O método variacional consiste em avaliar as integrais do lado direito da equação (2.16) com uma função de tentativa que geralmente depende de parâmetros. Neste trabalho se utiliza como funções de tentativa bases ortonormais (do tipo das equações 3.3 e 3.7) muito grandes. A diagonalização da matriz hamiltoniana gerada por uma destas bases (ver secões 3.1.2 e 3.2.2) pode demorar de 10 minutos até 6 horas. Assim, também se usa o parâmetro variacional não linear fixo (igual a 1) porque é necessária uma diagonalização para cada valor deste parâmetro; caso contrário, seriam necessárias várias diagonalizações para minimizar a base.

Esse método também fornece um limite superior para os estados excitados quando a função tentativa é ortogonal às autofunções dos estados inferiores. Supondo que Ψ é ortogonal a n autofunções $u_i (i = 0, 1, \ldots, n)$ dos estados $E_0, E_1, \ldots, E_n$ então, na equação (2.15), os coeficientes A_i correspondentes são nulos. Uma inequação pode ser obtida - substituindo cada autovalor E na soma do lado direito da equação (2.16) por E_{n+1} com o resultado que o valor esperado da energia é um limite superior para este autovalor. Na prática, o estado fundamental é o menor autovalor obtido na diagonalização da matriz hamiltoniana e os estados excitados são os outros autovalores em ordem crescente pois os autovetores são ortogonais dois a dois.

3. Procedimento Prático.

3.1 O hamiltoniano de Henon-Heiles.

Um sistema geral que não é separável nem ergódico (que não é separável devido a uma pequena perturbação , isto é, que é quase separável) bastante utilizado na literatura é o hamiltoniano de Henon-Heiles (em unidades com $\hbar = m = 1$):

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{\omega}{2}(x^2 + y^2) + bx(y^2 - x^2/3), \tag{3.1}$$

onde x e y são coordenadas e p_x e p_y são os momentos canônicos conjugados e b é uma constante de acoplamento. Para energias abaixo da energia crítica $E_c = 0.68D(D = 1/6b^2)$ todas as trajetórias pertencem a superfícies integráveis bem definidas (torus) de duas dimensões do espaço de fase de quatro dimensões [6]. Para energias levemente acima da energia crítica são encontradas trajetórias instáveis com respeito às condições iniciais que ocupam um volume tridimensional no espaço de fase, cujo número cresce rapidamente até a dissociação [6]. Como Pullen e Edmonds [8] e Noid e outros [7] neste trabalho utiliza-se sempre $\omega = 1$.

3.1.1 As simetrias.

Colocando o hamiltoniano da equação (3.1) em coordenadas polares $x = r\cos\theta$ e $y = r\sin\theta$ se obtém:

$$H = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + r^2 - \frac{1}{2r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{1}{3}br^3\cos 3\theta. \tag{3.2}$$

Os três primeiros termos do lado direito de (3.2) são invariantes a todas as rotações no plano XY e a todas reflexões em planos que contém o eixo perpendicular ao plano XY. As simetrias devem, então, ser obtidas analisando o termo $\cos 3\theta$. Como $\cos 3\theta$ é invariante a rotações de $2\pi/3$, $4\pi/3$, reflexões sobre o eixo x e reflexões sobre x com rotações de $2\pi/3$ e $4\pi/3$ conclui-se que o operador da equação (3.2) é invariante a 6 operações : E (transformação identidade), C_3, C_3^2, σ_ν, σ_d e σ'_d. Procurando em tabelas de caracteres (apêndice B de [24] e apêndice 1 de [26]) vê-se que essas operações geram o grupo $C_{3\nu}$ que tem os caracteres na tabela (3.1). Nesta tabela encontram-se representações irredutíveis do tipo A_1 e A_2, que correspondem a autovalores não degenerados, e do tipo E, que correspondem a autovalores duplamente degenerados.

C_{3v}	E	$2C_3$	3σ
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

Tabela 3.1. Tabela de caracteres do grupo C_{3v}

Como foi visto na seção (2.1.4), uma função arbitrária $\Psi(r,\theta)$ (nesse caso, uma autofunção do operador hamiltoniano (3.2)) pode ser decomposta nas três componentes irredutíveis do grupo C_{3v} através das equações (2.13) e (2.14) que dependem somente dos caracteres da tabela (3.1). Sendo $f^{(A_1)}(r,\theta)$ a função pertencente a representação A_1, vê-se que:

$$\begin{aligned}
f^{(A_1)}(r,\theta) = P^{(A_1)}\Psi(r,\theta) &= \frac{l_{A_1}}{h}\sum_R \chi^{A_1}(R)^* P_R\Psi(r,\theta) \\
&= \frac{1}{6}[1.P_E\Psi(r,\theta) + 1.P_{C_3}\Psi(r,\theta) + 1.P_{C_3^2}\Psi(r,\theta) + 1.P_{\sigma_v}\Psi(r,\theta) \\
&\quad + 1.P_{\sigma_d}\Psi(r,\theta) + 1.P_{\sigma'_d}\Psi(r,\theta)] \\
&= \frac{1}{6}[\Psi(r,\theta) + \Psi(r,\theta-2\pi/3) + \Psi(r,\theta-4\pi/3) + \Psi(r,-\theta) \\
&\quad + \Psi(r,-\theta-2\pi/3) + \Psi(r,-\theta-4\pi/3)] \\
&= \frac{1}{6}[\Psi(r,\theta) + \Psi(r,\theta+4\pi/3) + \Psi(r,\theta+2\pi/3) + \Psi(r,-\theta) \\
&\quad + \Psi(r,-\theta+4\pi/3) + \Psi(r,-\theta+2\pi/3)].
\end{aligned}$$

Como

$$\begin{aligned}
f^{(A_1)}(r,\theta+2\pi/3) &= \frac{1}{6}[\Psi(r,\theta+2\pi/3) + \Psi(r,\theta) + \Psi(r,\theta+4\pi/3) + \Psi(r,-\theta+2\pi/3) \\
&\quad + \Psi(r,-\theta) + \Psi(r,-\theta+4\pi/3)] \\
&= f^{(A_1)}(r,\theta)
\end{aligned}$$

se obtém também facilmente que $f^{(A_1)}(r,\theta) = f^{(A_1)}(r,\theta+4\pi/3) = f^{(A_1)}(r,-\theta) = f^{(A_1)}(r,-\theta+2\pi/3) = f^{(A_1)}(r,-\theta+4\pi/3)$. Assim, $f^{(A_1)}$ é simétrica às rotações de $2\pi/3$ e $4\pi/3$, à reflexão em x e à reflexão em x com rotações de $2\pi/3$ e $4\pi/3$, ou seja, é invariante a todas as transformações do grupo de simetria. A componente de $\Psi(r,\theta)$ pertencente a representação A_2, $f^{(A_2)}(r,\theta)$, tem a forma:

$$\begin{aligned}
f^{(A_2)}(r,\theta) &= P^{(A_2)}\Psi(r,\theta) \\
&= \frac{1}{6}[\Psi(r,\theta) + \Psi(r,\theta+4\pi/3) + \Psi(r,\theta+2\pi/3) - \Psi(r,-\theta) \\
&\quad - \Psi(r,-\theta+4\pi/3) - \Psi(r,-\theta+2\pi/3)].
\end{aligned}$$

Como $f^{(A_2)}(r,\theta) = f^{(A_2)}(r,\theta + 2\pi/3) = f^{(A_2)}(r,\theta + 4\pi/3) = -f^{(A_2)}(r,-\theta) = -f^{(A_2)}(r,-\theta + 2\pi/3) = -f^{(A_2)}(r,-\theta + 4\pi/3)$ vê-se que $f^{(A_2)}$ é uma função simétrica a rotações de $2\pi/3$ e $4\pi/3$, e é antissimétrica a reflexões em x e reflexões em x com rotações de $2\pi/3$ e $4\pi/3$.

Para base variacional pode-se usar as autofunções do oscilador harmônico bidimensional em coordenadas polares, ou seja (na seção (3.1.3) mostra-se a conveniência de sua escolha) :

$$\Psi_{nl}(r,\theta) = (2\pi)^{-1/2} R_{nl}(r) e^{il\theta}, \tag{3.3}$$

onde $n = \{0,1,2,\ldots\}$, $l = \{-n,-n+2,\ldots,n\}$ e R_{nl} é dada por:

$$R_{nl}(r) = \left\{ \frac{2[(n-l)/2]!}{[(n+l)/2]!^3} \right\}^{1/2} r^l e^{-r^2/2} L^l_{\frac{(n+l)}{2}}(r^2), \qquad l \geq 0$$

em que L são polinômios de Laguerre [28]. Os estados do tipo A são obtidos restringindo-se l a $\{0,\pm3,\pm6,\ldots\}$ na equação (3.3) para manter invariância a rotações de $2\pi/3$ e $4\pi/3$. Os estados duplamente degenerados correspondem, então, a $l = \{\pm1,\pm2,\pm4,\ldots\}$. Como $\Psi_{nl}(r,-\theta) = (-1)^l \Psi_{n,-l}(r,\theta)$ [28], para que a função $f^{(A_1)}$ seja simétrica a reflexão em x é necessário que ($\Psi(n,l) \equiv \Psi_{n,l}(r,\theta)$):

$$\begin{aligned} f^{(A_1)}_{nl} &= C[\Psi_{nl}(r,\theta) + \Psi_{nl}(r,-\theta)] \\ &= C[\Psi(n,l) + (-1)^l \Psi(n,-l)] \end{aligned} \tag{3.4}$$

com $n = \{0,1,2,\ldots\}$ e l restringido a $\{0,3,6,\ldots\}$, visto que $|f^{(A_1)}_{nl}| = |f^{(A_1)}_{n,-l}|$ e apenas se deve incluir funções ortogonais na base. $C = (2)^{-1/2}$ se $l \neq 0$ ou $C = 1/2$ se $l = 0$. Para que a função $f^{(A_2)}$ seja antissimétrica a reflexões em x é necessário que:

$$\begin{aligned} f^{(A_2)}_{nl} &= C[\Psi_{nl}(r,\theta) - \Psi_{nl}(r,-\theta)] \\ &= C[\Psi(n,l) - (-1)^l \Psi(n,-l)], \end{aligned} \tag{3.5}$$

com $n = \{0,1,2,\ldots\}$, l restringido a $\{3,6,9\ldots\}$ e $C = (2)^{-1/2}$. Da componente de $\Psi(r,\theta)$ pertencente a representação E

$$f^{(E)}(r,\theta) = \frac{1}{3}[2\Psi(r,\theta) - \Psi(r,\theta + 2\pi/3) - \Psi(r,\theta + 4\pi/3)]$$

pode-se apenas concluir que não há invariância a rotações de $2\pi/3$ e $4\pi/3$.

As equações (2.11) e (2.12) mostram que ainda é possível decompor os estados de simetria E (que pertencem a uma representação irredutível bidimensional) nas componentes pertencentes a cada linha de sua representação irredutível, embora (2.11) dependa da forma matricial dessa representação. A representação bidimensional pode ser obtida usando-se as matrizes de rotação no sistema cartesiano bidimensional [26], ou seja:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

que são ortogonais e irredutíveis pois nenhuma matriz de dimensão menor pode representar rotações em geral no plano. Fazendo $\theta = 0$, $2\pi/3$ e $4\pi/3$ se obtém, respectivamente, as representações de E, C_3 e C_3^2, ou seja:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad C_3 = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}, \quad C_3^2 = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}.$$

Para reflexão no eixo x é necessário que:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \end{pmatrix}$$

e a representação matricial têm a forma:

$$\sigma_v = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

As matrizes que representam reflexões com rotação σ_d e σ_d' são obtidas fazendo-se o produto matricial de σ_v com C_3 e C_3^2. O resultado é:

$$\sigma_d = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix} \quad e \quad \sigma_d' = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

Usando (2.11), (2.12) e as representações matriciais acima, a parte de $f^{(E)}$ pertencente a primeira coluna fica na forma:

$$\begin{aligned} f^{(E_1)}(r,\theta) &= P_{11}^{(E)}\Psi(r,\theta) = \frac{l_E}{h}\sum_R D^{(E)}(R)_{11}^{*}\Psi(r,\theta)P_R \\ &= \frac{2}{6}[1.\Psi(r,\theta) - \frac{1}{2}.\Psi(r,\theta-2\pi/3) - \frac{1}{2}.\Psi(r,\theta-4\pi/3) + 1.\Psi(r,-\theta) \\ &\quad - \frac{1}{2}.\Psi(r,-\theta-2\pi/3) - \frac{1}{2}.\Psi(r,-\theta-4\pi/3)]. \end{aligned}$$

Como $f^{(E_1)}(r,\theta) = f^{(E_1)}(r,-\theta)$, vê-se que ela é simétrica a reflexões em x. Para que essa condição seja satisfeita é necessário que:

$$\begin{aligned} f_{nl}^{(E_1)}(r,\theta) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_{nl}(r,\theta) + \Psi_{nl}(r,-\theta)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi(n,l) + (-1)^l\Psi(n,-l)]. \end{aligned}$$

Pode-se ver que $\mid f_{nl}^{(E_1)} \mid = \mid f_{n,-l}^{(E_1)} \mid$, o que restringe l a $\{1,2,4,\ldots\}$ ou $\{-1,-2,-4,\ldots\}$ para que somente funções ortogonais sejam incluídas na base. É interessante notar que o número de estados degenerados necessários para a diagonalização ficou reduzido pela metade.

3.1.2 Os elementos de matriz.

Após obter as simetrias do hamiltoniano da equação (3.2) é necessário calcular os elementos de matriz desse operador na base das funções simétricas $f_{nl}^{(A_1)}$, $f_{nl}^{(A_2)}$ e $f_{nl}^{(E_1)}$ da seção anterior que, com a diagonalização da matriz formada por eles, permitem obter o espectro de energias.

Para obter a matriz hamiltoniana do operador da equação (3.2), é suficiente utilizar a relação de ortogonalidade:

$$\int \Psi^*(n',l')\Psi(n,l)r dr d\theta = \delta_{n'n}\delta_{l'l},$$

em que $\Psi(n,l) = \Psi_{nl}(r,\theta)$, e as relações de recorrência [28]:

$$p_+\Psi(n,l) = -i\hbar\left(\frac{n+l+2}{2}\right)^{1/2}\Psi(n+1,l+1) - i\hbar\left(\frac{n-l}{2}\right)^{1/2}\Psi(n-1,l+1)$$

$$p_-\Psi(n,l) = i\hbar\left(\frac{n+l}{2}\right)^{1/2}\Psi(n-1,l-1) + i\hbar\left(\frac{n-l+2}{2}\right)^{1/2}\Psi(n+1,l-1)$$

$$x_+\Psi(n,l) = -\left(\frac{n+l+2}{2}\right)^{1/2}\Psi(n+1,l+1) + \left(\frac{n-l}{2}\right)^{1/2}\Psi(n-1,l+1)$$

$$x_-\Psi(n,l) = -\left(\frac{n+l}{2}\right)^{1/2}\Psi(n-1,l-1) + \left(\frac{n-l+2}{2}\right)^{1/2}\Psi(n+1,l-1),$$

nas quais $x_\pm = x \pm iy = r\exp(\pm i\theta)$ e $p\pm = p_x \pm ip_y = -i\hbar\exp(\pm i\theta)[(\partial/\partial_r) \pm (i/r)(\partial/\partial_\theta|$.

Os elementos de matriz:

$$\langle n'l' \mid H \mid nl\rangle = \langle n'l' \mid H_0 \mid nl\rangle + b\,\langle n'l' \mid H_1 \mid nl\rangle\,,$$

onde H_0 é o oscilador harmônico bidimensional não perturbado (três primeiros termos do lado direito de (3.2)) e H_1 é dado por:

$$H_1 = -\frac{1}{3}r^3\cos 3\theta = -(x_+^3 + x_-^3)/3,$$

são iguais a:

$$\begin{aligned}
\langle n'l' \mid H_0 \mid nl\rangle &= (n+1)\delta_{n'n}\delta_{l'l} \pm (-1)^l(n+1)\delta_{n'n}\delta_{l',-l},\\
\langle n'l' \mid H_1 \mid nl\rangle &= S_{nl} \pm S_{n,-l}, \qquad l' \quad e \quad l \neq 0\\
\langle n'l' \mid H_0 \mid nl\rangle &= C_1(n+1)\delta_{n'n}\delta_{l'l},\\
\langle n'l' \mid H_1 \mid nl\rangle &= C_2 S_{nl},
\end{aligned}$$

em que $C_1 = C_2 = 1$, se $l = l' = 0$ e $C_1 = 0, C_2 = (2)^{1/2}$, se $l' \neq l = 0$ ou se $l \neq l' = 0$; o sinal positivo é usado para as funções pertencentes à representação A_1 e E_1 e o negativo para as pertencentes a representação A_2 e:

$$S_{n,l} = -\frac{1}{6}\sum \delta_{l',l\pm 3}[A_1^{\pm}\delta_{n',n+3} + A_2^{\pm}\delta_{n',n+1} + A_3^{\pm}\delta_{n',n-1} + A_4^{\pm}\delta_{n',n-3}].$$

O somatório indica a soma entre os termos com sinal positivo e negativo [29] e:

$$A_1^{\pm} = \mp[\frac{1}{8}(n \pm l + 2)(n \pm l + 4)(n \pm l + 6)]^{1/2},$$

$$A_2^{\pm} = \pm 3[\frac{1}{8}(n \mp l)(n \pm l + 2)(n \pm l + 4)]^{1/2},$$

$$A_3^{\pm} = \mp 3[\frac{1}{8}(n \mp l - 2)(n \mp l)(n \pm l + 2)]^{1/2},$$

$$A_4^{\pm} = \pm[\frac{1}{8}(n \mp l - 4)(n \mp l - 2)(n \mp l)]^{1/2}.$$

Esses elementos de matriz são utillizados no programa em FORTRAN do apêndice A.

3.1.3 Técnicas de diagonalização e convergência dos autovalores

Observando as matrizes em dimensões pequenas (em torno de 50×50) se conclui que elas tem um número bem definido de diagonais não nulas e são simetricas, o que permite a mudança do modo de armazenamento geral para o modo de armazenamento simétrico por bandas (apêndice C) implicando uma grande diminuição do tempo e da quantidade de memória necessários a diagonalização. Isso também indica que a base variacional escolhida permite boa convergência dos autovalores pois quanto menor o número de codiagonais menor o erro devido ao truncamento da base das funções $f_{nl}^{(A_1)}$, $f_{nl}^{(A_2)}$ e $f_{nl}^{(E_1)}$. Uma rotina conveniente para diagonalizações desse tipo é a EIGBS do IMSLIB.

Esse fator aliado ao uso das simetrias do hamiltoniano, que permitem diagonalizar separadamente os estados pertencentes às representações A_1, A_2 e E, torna muito mais rápida a obtenção do espectro. Esse aspecto é ilustrado comparando a diagonalização do hamiltoniano com todos os estados $\Psi_{ln}(r,\theta)$ (tabela (3.2)) com a diagonalização separada da matriz hamiltoniana dos estados degenerados $f_{nl}^{(E_1)}$: simetria E_1 (tabela (3.3)), da matriz hamiltoniana com estados pertencentes a simetria A_1 $f_{nl}^{(A_1)}$ (tabela (3.4)) e da matriz hamiltoniana com estados pertencentes a simetria A_2 $f_{nl}^{(A_2)}$ (tabela (3.5)). Os autovalores correspondentes da tabela (3.2) e das tabelas (3.3), (3.4) e (3.5) são iguais desde que as matrizes hamiltonianas pertencentes a cada simetria sejam truncadas em determinada dimensão com mesmo n máximo ($k_{max} = n_{max} + 1$). É importante ver nas tabelas que, para o mesmo $k_{max} = 24$, a dimensão da base da matriz hamiltoniana de todos os estados (de 300) é aproximadamente 6 vezes maior do que as dimensões das bases das matrizes de simetria A_1 e A_2, respectivamente, de 56 e 44 e é 3 vezes maior do que a dimensão da base dos estados de simetria E_1 (primeira coluna da representação E) de 100. Todas estas tabelas foram obtidas através do programa em FORTRAN do apêndice A executado no computador IBM 4341 da UFSC.

i	E_i	E_{i+40}	E_{i+80}
1	0.99859485906259	8.67795227293568	12.06582872539650
2	1.99007737619346	8.81134251303964	12.21304796009772
3	1.99007737619346	8.81520603326459	12.21304796009772
4	2.95624569677584	9.02172504061643	12.28750240888049
5	2.98532737225401	9.02172504061643	12.34387075736006
6	2.98532737225401	9.44426638805477	12.49062805898939
7	3.92596835076758	9.44426638805477	12.49062805898939
8	3.92596835076758	9.46701812440540	12.73062239888773
9	3.98241860851574	9.55241819276881	12.73062239888775
10	3.98576181424165	9.62945393473120	12.91572616440730
11	4.87015214635890	9.62945393473121	12.91572616440731
12	4.89865068893398	9.79416162235084	12.92255459337725
13	4.89865068893398	9.79416162235085	13.06183218954053
14	4.98625212741046	10.03543210292864	13.07871053723000
15	4.98625212741046	10.03559876717094	13.08980720077442
16	5.81703073140904	10.30691254827371	13.11908610990116
17	5.81703073140904	10.32027508701149	13.11908610990117
18	5.86702406041107	10.32027508701149	13.26800398225280
19	5.88145338171986	10.46370007454824	13.26800398225281
20	5.99132800432410	10.46370007454824	13.45153716884023
21	5.99132800432410	10.57269210481806	13.45787326657008
22	6.73793305405771	10.59096214647616	13.71109081559396
23	6.76488203865333	10.77424286973971	13.71109081559397
24	6.76488203865333	10.77424286973972	13.86033260460634
25	6.85344043536324	11.04987227622767	13.87081997504799
26	6.85344043536324	11.04987227622767	13.87081997504800
27	6.99893291350846	11.16379029460050	13.97931661397793
28	6.99938781104376	11.16379029460050	13.97931661397794
29	7.65950853306282	11.17347785145959	14.04153493033172
30	7.65950853306282	11.32623843272900	14.09267431424144
31	7.69774378142024	11.38484247078901	14.09267431424144
32	7.73690075193492	11.38484247078902	14.11448762273961
33	7.83274717502388	11.53577714853614	14.23345466678787
34	7.83274717502388	11.53577714853615	14.23345466678787
35	8.00942568929002	11.75223765729108	14.43937802434376
36	8.00942568929002	11.75334025722531	14.43937802434376
37	8.55406527290512	12.01976084871596	14.69976665592764
38	8.57639408180695	12.02473422317280	14.70355556650313
39	8.57639408180695	12.02473422317281	14.85236463515905
40	8.67795227293568	12.06582872539650	14.85236463515907

tabela 3.2. Todos estados: b=0.1118, dim = 300, k_{max} =24, nc =69. Níveis de energia correspondentes aos 120 menores autovalores resultantes da diagonalização de uma matriz hamiltoniana gerada por 300 estados (dimensão da base) obtidos para $k_{max} = 24$. nc é o número de codiagonais utilizado para o armazenamento da matriz por bandas.

i	E_i	E_{i+15}	E_{i+30}
1	1.99007737619348	9.44426638805512	12.91572616440800
2	2.98532737225405	9.62945393473169	13.11908610990234
3	3.92596835076763	9.79416162235135	13.26800398225379
4	4.89865068893409	10.32027508701193	13.71109081559512
5	4.98625212741060	10.46370007454889	13.87081997504901
6	5.81703073140918	10.77424286974030	13.97931661397953
7	5.99132800432427	11.04987227622822	14.09267431424254

8	6.76488203865353	11.16379029460121	14.23345466678923
9	6.85344043536350	11.38484247078983	14.43937802434463
10	7.65950853306307	11.53577714853672	14.85236463516041
11	7.83274717502421	12.02473422317365	14.95350875776868
12	8.00942568929028	12.06582872539754	15.08610097536843
13	8.57639408180729	12.21304796009858	15.11172301671930
14	8.67795227293607	12.49062805899013	15.45404153493105
15	9.02172504061676	12.73062239888886	15.71183376199891

tabela 3.3. Estados degenerados: b=0.1118, dim=100, k_{max}=24, nc=23. Os primeiros 45 níveis resultantes da diagonalização da matriz hamiltoniana gerada pelos 100 estados de simetria E_1 obtidos para um k_{max} de 24. A projeção na primeira linha da representação E reduz a dimensão da matriz dos estados degenerados pela metade, ou seja, usando somente os caracteres da tabela (3.1) a dimensão da matriz hamiltoniana seria o dobro (ver final da seção 3.1.1).

i	E_i	E_{i+20}	E_{i+40}
1	0.99859485906259	13.45153716884106	20.03265546797520
2	2.95624569677587	13.86033260460728	20.82007260418704
3	3.98241860851580	14.11448762274062	21.21578747847273
4	4.87015214635899	14.69976665592872	21.57064963719171
5	5.86702406041119	14.89197930786454	21.61483861396427
6	6.73793305405790	15.23226236936360	22.14223631511685
7	6.99938781104396	15.82330587772221	22.32399811888302
8	7.69774378142046	16.06667842820548	22.77086910664554
9	8.55406527290540	16.15967294266331	23.22966367843529
10	8.81520603326492	16.51105623205180	23.51159083388024
11	9.46701812440577	17.01161806431731	24.05289919947847
12	10.03543210292906	17.31461147356225	25.30311123167153
13	10.30691254827427	17.73438290325117	25.41662458144828
14	10.59096214647665	17.88959145956806	26.54714887921188
15	11.17347785146010	18.37870567263545	28.11505911631181
16	11.75223765729177	18.64429378322561	30.09651791261729
17	12.01976084871665	19.18919509331923	
18	12.34387075736086	19.43867913537692	
19	12.92255459337806	19.78802608862399	
20	13.07871053723074	19.86638584926812	

tabela 3.4. Simetria A1: b=0.1118, dim=56, k_{max}=24, nc=14. Níveis de energia correspondentes aos 56 autovalores resultantes da diagonalização da matriz hamiltoniana gerada pelos 56 estados de simetria A_1 obtidos para um k_{max} de 24.

i	E_i	E_{i+15}	E_{i+30}
1	3.98576181424173	14.70355556650471	20.43776185235965
2	5.88145338172001	14.88552586235866	21.02897447020952
3	6.99893291350867	15.24814998885419	21.08825960603608
4	7.73690075193518	15.96647859692032	21.57870603371648
5	8.81134251304003	16.15532836827447	22.02850896594206
6	9.55241819276931	16.50427115136823	22.46841490401467
7	10.03559876717153	16.78988080098586	22.89407349845844
8	10.57269210481862	17.26029690676933	23.28085416922876
9	11.32623843272971	17.86263171940856	23.69106097017154
10	11.75334025722614	18.10068663519366	24.16841632904988

11	12.28750240888147	18.58878929995978	24.64346055285158
12	13.06183218954185	18.73135658950345	25.98489055129731
13	13.08980720077570	19.42597289718267	27.26167145404282
14	13.45787326657118	19.55827531333077	29.06257300331013
15	14.04153493033301	20.00794481741809	

tabela 3.5. Simetria A2: b=0.1118, dim=44, k_{max}=24, nc=14. Todos os 44 autovalores resultantes da diagonalização da matriz hamiltoniana gerada pelos 44 estados de simetria A_2 obtidos para um k_{max} de 24.

A dimensão da base depende de dois fatores. A matriz deve ser grande o suficiente para que os autovalores convirjam com a precisão necessária quando comparados com os autovalores de outras dimensões. Entretanto, os autovalores começam a divergir com o aumento do tamanho da base devido a influência da própria base com parte significante de sua densidade de probabilidade fora dos estados ligados do potencial de Henon-Heiles [8,10]. Além disso, devido ao tunelamento não há, rigorosamente, nenhum estado ligado no sistema embora para pequenas exitações o erro em assumir estados discretos é pequeno. Truncar a matriz antes da divergência ocorrer consiste em colocar uma barreira de potencial positiva e infinita junto aos pontos extremos do potencial. Fazendo essas considerações, Pullen e Edmonds utilizaram em seu trabalho o valor ótimo de 230 na dimensão da base das simetrias unidimensionais para b=0.088.

O estudo da divergência é facilitado usando-se b=0.1118 porque ela pode ser observada em dimensões menores devido ao menor número de estados ligados. A tabela 3.6 mostra o que ocorre quando se aumenta arbitrariamente a dimensão da base. Na segunda coluna estão contidos os autovalores de energia para $k_{max} = 70$. Comparando com as tabelas 8 e 9 do apêndice E vê-se que todos os autovalores menores que a energia de dissociação D=13.33 concordam com no mínimo 6 casas decimais.

i	$E_i(k_{max} = 70)$	$E_i(k_{max} = 76)$	$E_i(k_{max} = 90)$	$E_i(k_{max} = 110)$
1	0.998594859063	0.998594859063	0.998594859063	-1.827881225008
2	2.956245696776	2.956245696776	2.956245696776	0.998594859063
3	3.982418608515	3.982418608515	3.982418608515	2.956245696776
4	4.870152146336	4.870152146336	4.870152146336	3.467347780192
5	5.867024059365	5.867024059365	5.867024059365	3.982418608515
6	6.737933026058	6.737933026058	6.737933026058	4.118536359952
7	6.999387805393	6.999387805393	6.999387805393	4.870152146335
8	7.697742940915	7.697742940915	7.383348669103	5.867024059365
9	8.554053117427	8.554053117427	7.697742940915	6.737933026058
10	8.815202190604	8.815202190604	8.554053117427	6.999387805392
11	9.466812605598	9.466812605598	8.815202190604	7.697742940914
12	10.035414257521	10.035414257521	9.466812605598	8.056170109041
13	10.305191649228	10.305191649227	10.035414257521	8.492972255821
14	10.590498360829	10.590498360829	10.305191649227	8.554053117426
15	11.160325736894	11.160325736432	10.590498360828	8.815202190604
16	11.749545568601	11.749545542239	11.160325735109	9.466812605598
17	11.966165418719	11.780553917634	11.295035145244	9.500775242539
18	12.333823173904	11.966165678421	11.749545570152	10.035414257520
19	12.748292713872	12.333823282449	11.966165479615	10.305191649226
20	13.076984856220	12.748312478983	12.196804192634	10.590498360827

21	13.079795205570	13.076992130422	12.333823238845	11.094305082055
22	13.392669183485	13.392276725254	12.748307821661	11.160325739924
23	13.510740123229	13.509888246637	13.076992109512	11.749545569494
24	14.019610090923	13.997134993856	13.392009236264	11.966165458706
25	14.151195917105	14.077710822904	13.508448292971	12.333823209361
26	14.574130788696	14.234860905669	13.640869016339	12.684767426278
27	14.652042495550	14.651881265824	14.023094318517	12.748306669249
28	14.992145423413	14.748370028315	14.161481717703	13.076992059011

Tabela 3.6. Divergência dos níveis de energia pertencentes a simetria A_1 quando a base é aumentada arbitrariamente.

Na terceira coluna, obtida para uma base de dimensão com $k_{max} = 76$, observa-se um novo autovalor $E_{17} = 11.78$ que não aparecia nas dimensões inferiores. No entanto, os outros autovalores continuam iguais aos obtidos utilizando dimensões menores. Usando $k_{max} = 90$ (quarta coluna) surgem 3 novos autovalores e utilisando $k_{max} = 110$ (quinta coluna) já aparecem 9 autovalores bem diferentes dos obtidos através de dimensões inferiores. É muito interessante notar que os outros autovalores permanecem iguais com uma precisão de no mínimo 7 casas decimais em relação às dimensões anteriores. Para a base com $k_{max} = 130$ aparecem 19 autovalores diferentes daqueles obtidos usando dimensões inferiores em energias abaixo da energia de dissociação, ou seja, a medida que se aumenta a base os autovalores tendem à um contínuo mesmo para energias abaixo da energia de dissociação.

Desprezando os efeitos de tunelamento não se deve escolher bases com dimensões maiores que a máxima dimensão sem divergência dos autovalores. No entanto, nada impede que se escolha dimensões menores desde que os autovalores calculados apresentem precisão suficiente quando comparados com os da base máxima sem divergência. Por exemplo para b=0.1118, a base com $k_{max} = 56$ da simetria A_1 (tabela 8 do apêndice E) não apresenta qualquer sinal de divergência mas uma base com $k_{max} = 44$ desta mesma simetria (ver tabela 9 do apêndice E) fornece praticamente os mesmos autovalores com maior rapidez e menor quantidade de memória para o armazenamento. Assim, a dimensão com $k_{max} = 44$ é a melhor dimensão para a simetria A_1. Deve-se investigar se este valor de truncamento da base de simetria A_1 também é valido para as simetrias A_2 e E_1. As tabelas 6 e 7 (apêndice E) da simetria E_1 e as tabelas 10 e 11 (apêndice E) da simetria A_2 mostram que os autovalores obtidos com $k_{max} = 44$ convergem de no mínimo 5 casas decimais até 14 casas decimais em relação aos autovalores obtidos com $k_{max} = 56$ mostrando que o melhor valor de k_{max} obtido na simetria A_1 continua válido nas simetrias A_2 e E_1.

Para b=0.088 na dimensão de 1045 ($k_{max} = 110$) também aparece um autovalor diferente (que não aparecia nas dimensões inferiores) entre os níveis com energia menor que a energia de dissociação de 21.52. Analisando estados de simetria A_1 vê-se que a base com $k_{max} = 80$ não apresenta qualquer sinal de divergência mas a base com $k_{max} = 68$ fornece praticamente os mesmos resultados: os autovalores convergem de no mínimo 4 casas decimais até 14 casas decimais em relação a base com $k_{max} = 80$ (comparar tabelas 2 e 3 ou 4 e 5 do apêndice E). A dimensão dim=408 (para $k_{max} = 68$) da simetria A_1 está acima do valor sugerido por Pullen e Edmonds de 230 [8], mas fornece maior precisão dos autovalores quando comparados com os de dimensões maiores.

3.1.4 As segundas diferenças

O comportamento de cada autovalor com relação a uma pequena mudança na perturbação pode ser medido usando-se as segundas diferenças

$$\Delta^2 E_i = [E_i(b+\delta b) - E_i(b)] - [E_i(b) - E_i(b-\delta b)].$$

Valores pequenos diferentes de δb fornecem segundas diferenças proporcionais. Na tabela (3.6) estão os valores calculados para $\delta b = 0.001$ (segunda coluna), para $\delta b = 0.002$ (terceira coluna) e a razão entre as segundas diferenças correspondentes (quarta coluna). Essa razão praticamente constante justifica o uso das segundas diferenças no estudo da sensibilidade dos níveis de energia.

i	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$	$-\Delta^2 E_i' \times 10^5$	RAZAO
1	0.02389	0.09556	0.25000
2	0.25972	1.03888	0.25000
3	0.16510	0.66045	0.24998
4	0.50205	2.00826	0.24999
5	0.68020	2.72114	0.24997
6	0.83751	3.35040	0.24997
7	0.19730	0.78953	0.24990
8	1.33062	5.32354	0.24995
9	1.49028	5.96346	0.24990
10	0.82246	3.29092	0.24992
11	2.37455	9.50263	0.24988
12	0.70492	2.83094	0.24901
13	2.97317	11.89665	0.24992
14	1.04328	4.17614	0.24982
15	4.58642	18.37286	0.24963
16	3.70256	15.03026	0.24634
17	5.62497	22.38078	0.25133
18	1.73666	7.04223	0.24661
19	11.31922	45.49278	0.24881
20	2.96198	11.94388	0.24799

Tabela 3.7. Segundas diferenças para 20 níveis pertencentes a simetria A_1 com b=.1118, $k_{max} = 44$, $\delta b = 0.001$ (segunda coluna) e $\delta b = 0.002$ (terceira coluna).

As segundas diferenças para uma mudança $\delta b = 0.001$ no parâmetro de perturbação $b = 0.088$ são mostradas na tabela (3.8) na qual se observa que a partir da energia $E = 16.13 = 0.61D$ são encontrados vários autovalores com segundas diferenças de módulo muito maior do que para as energias inferiores. Esses autovalores são evidentemente muito mais sensíveis a pequenas mudanças na pertubação. Esses resultados estão de acordo com os de Pomphrey [6] que utilizou $\omega = 3^{-1/2}$ ao invés de $\omega = 1$ na equação (3.1).

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	3.9914642342909	3.9912638120174	3.9910609533868	0.06104
2	5.9284379701081	5.9267776617251	5.9250979303889	0.32772
3	7.0026258530824	7.0025780084443	7.0025239453817	0.08880
4	7.8405959646155	7.8369149451404	7.8331919052128	0.53619
5	8.8958628850429	8.8931470458369	8.8903819703138	0.55364
6	9.7280896360769	9.7218344918968	9.7155093170424	0.72034

7	10.0323776599811	10.0327935593331	10.0331956382718	0.13775
8	10.7609528841967	10.7548229464174	10.7485866771617	0.98869
9	11.5908026722003	11.5813997212663	11.5718907263471	0.91564
10	11.8802963454254	11.8766882442645	11.8729850901626	0.80033
11	12.5968757551795	12.5865165450547	12.5759754816880	1.44483
12	13.0777544245983	13.0787511646214	13.0797078575100	0.30620
13	13.4278905684445	13.4146648006816	13.4012777545670	1.20225
14	13.7000709011878	13.6917530320009	13.6832556317551	1.31124
15	14.4020066211327	14.3864693647337	14.3706448863408	1.99647
16	14.8736696721862	14.8687099428441	14.8635386031293	1.42319
17	15.2368187765816	15.2187967007534	15.2005067107507	1.76042
18	15.4930753587699	15.4795520017300	15.4657826563166	1.58912
19	16.1355478468270	16.1363244946419	16.1276424607866	58.61732
20	16.1738847092760	16.1525771382104	16.1401536136893	-55.00080
21	16.6402461001974	16.6286277410762	16.6166312707055	2.27386
22	17.0117122275917	16.9872555658114	16.9623114360833	2.86961
23	17.2628200069361	17.2439894803826	17.2248928385095	1.54324
24	17.8668974590612	17.8558210542822	17.8366822513874	45.15277
25	17.9094599545417	17.8829416630963	17.8632569376683	-38.21276
26	18.3780002165795	18.3589891983185	18.3393874893457	3.21745
27	18.7421813730165	18.7086994089881	18.6743598469637	4.58395
28	19.0147262565062	18.9907818278000	18.9665369501840	1.58208
29	19.2012421628111	19.2019520890954	19.2021898980025	2.45869
30	19.5609525843701	19.5313315506421	19.4949331299263	34.70008
31	19.6093090487733	19.5818464871485	19.5593172714764	-25.19347
32	20.0862682900193	20.0584931544690	20.0295546669202	5.79980
33	20.4158629234451	20.3701581827869	20.3231732763267	6.28452
34	20.7489466898588	20.7189431692348	20.6881065326478	4.02104
35	20.8565619848968	20.8433262426323	20.8289132813055	5.64794
36	21.1957876842074	21.1438074008255	21.0876288276921	19.85588
37	21.2854697462083	21.2568260888001	21.2295090913989	-6.24110

Tabela 3.8. Simetria A2, b=0.088, δb=0.001, dim = 374 ($k_{max} = 68$). A partir do nível 19 surgem segundas diferenças de módulo muito maior do que para os níveis inferiores. Para dim =620 ($k_{max} = 80$) as segundas diferenças são iguais em no mínimo quatro casas decimais (apêndice E).

No apêndice E estão contidas as segundas diferenças para as simetrias A_1 e E_1 com $k_{max} = 80$ e para as simetrias A_1, A_2 e E_1 com $k_{max} = 68$ mostrando que os resultados são praticamente iguais. Também estão incluídas as segundas diferenças para b=0.1118 para estas simetrias com $k_{max} = 44$ e com $k_{max} = 56$. Os resultados também concordaram bastante em relação a variação das dimensões em todas as simetrias comprovando o que foi discutido na seção anterior. É interessante notar que para b=0.1118 é encontrado apenas um par de grandes segundas diferenças que corresponde aos autovalores de energia $E_{30} = 12.71$ e $E_{31} = 12.72$ pertencentes a simetria E_1 (tabela 6 ou 7 do apêntice E). Isso ocorre porque a energia de dissociação $D = 1/6b^2$ diminui a medida que o valor de b aumenta, isto é, o número de estados ligados ou discretos do sistema diminui com o aumento do parâmetro de perturbação. Como para b=0.1118 há um número menor de estados ligados também deve-se esperar um número menor de autovalores sensíveis.

Caso as simetrias não tivessem sido utilizadas a dimensão da base da matriz hamiltoniana de todos os estados deveria ser de 3240 para $k_{max} = 80$. Seriam necessários aproximadamente 6 horas de computação para a diagonalização e, ainda, com grandes possibilidades de erro devido ao truncamento dos elementos de matriz durante o processo de diagonalização. Usando as simetrias, a diagonalização ocorre em poucos minutos: mais ou menos 10 para as simetrias A_1 e A_2 e um pouco mais para a simetria E. Além disso, como não é permitido o cruzamento de níveis de mesma simetria [8,10], pode-se ter certeza que as grandes segundas diferenças realmente correspondem a cruzamentos evitados no gráfico do parâmetro de perturbação em função da energia.

As figuras (1) a (3) mostram os gráficos da energia em função das segundas diferenças para as componentes de simetria A_1, A_2 e E_1 com b=0.088. Pode-se ver que alguns dos autovalores de maior energia tem segundas diferenças muito grandes, ou seja, são muito sensíveis. Isto indica que o sistema quântico está efetuando a transição do comportamento quântico regular para o comportamento quântico caótico. Os primeiros autovalores sensíveis são : $E_{39} = 19,20$ da simetria A_1, $E_{19} = 16,14 = 0.61D$ da simetria A_2 e $E_{56} = 17,60$ da simetria E_1. A energia quântica de transição (denominada de energia crítica quântica) $E_{cq} = 0.61D$ está próxima da energia crítica clássica calculada por Henon e Heiles [6] $E_{cc} = 0.68D$ mostrando a semelhança dos comportamentos clássico e quântico.

As figuras (4) a (9) mostram os gráficos da energia em função do parâmetro de perturbação. A figura 4 consiste no gráfico de dois níveis de energia da simetria A_2 que tem pequenas segundas diferenças. Os autovalores permanecem igualmente afastados durante todo o intervalo de variação do parâmetro de perturbação b. Na figura 5, ao contrário, se observa uma aproximação e tentativa de cruzamento entre os níveis quando o parâmetro de perturbação b é mudado. A aproximação e afastamento consistem num cruzamento evitado entre dois níveis. Na figura 6 o cruzamento evitado fica menos avidente porque os níveis 24 e 25 são menos sensíveis (tem segunda diferença menor) do que os níveis 19 e 20 da figura 5. As figuras 7,8, e 9 mostram, respectivamente, os cruzamentos evitados entre os níveis: 39 e 40 da simetria A_1, 56 e 57 da simetria E_1 e 60 e 61 da simetria E_1. Nos gráficos das figuras 7 e 9 nota-se que a aproximação e a repulsão entre as maiores segundas diferenças foram muito maiores. Apenas se pode ter certeza que não ocorre cruzamento entre os níveis nestes dois gráficos devido ao teorema de von Neumann e Wigner(1929), Teller(1937) e Arnol'd(1978) que proibe o cruzamento de níveis de mesma simetria. A figura (10) mostra que a única grande segunda diferença encontrada para b=0.1118 também corresponde a um cruzamento evitado.

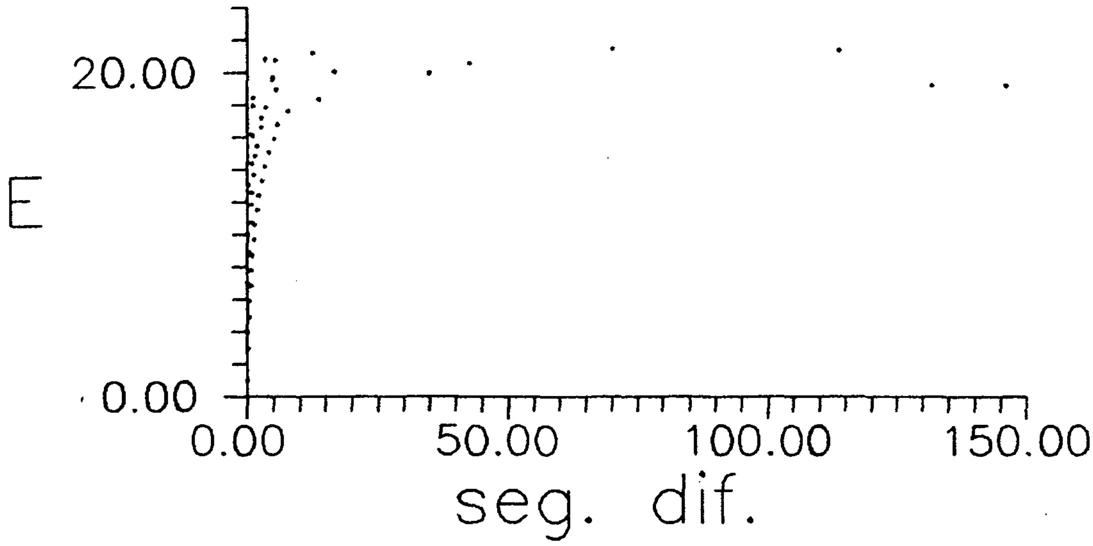


Figura 1. Gráfico da energia em função das segundas diferenças para 50 níveis pertencentes a simetria A_1 ($k_{max} = 68$, b=0.088 e δ b =0.001).

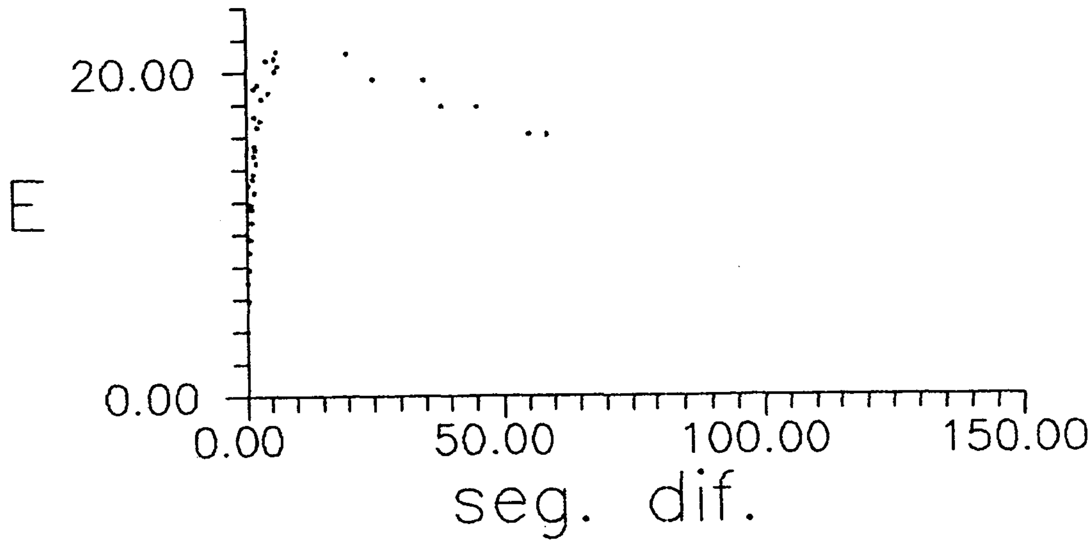


Figura 2. Gráfico da energia em função das segundas diferenças para 37 níveis pertencentes a simetria A_2 ($k_{max} = 68$, b=0.088 e δ b =0.001).

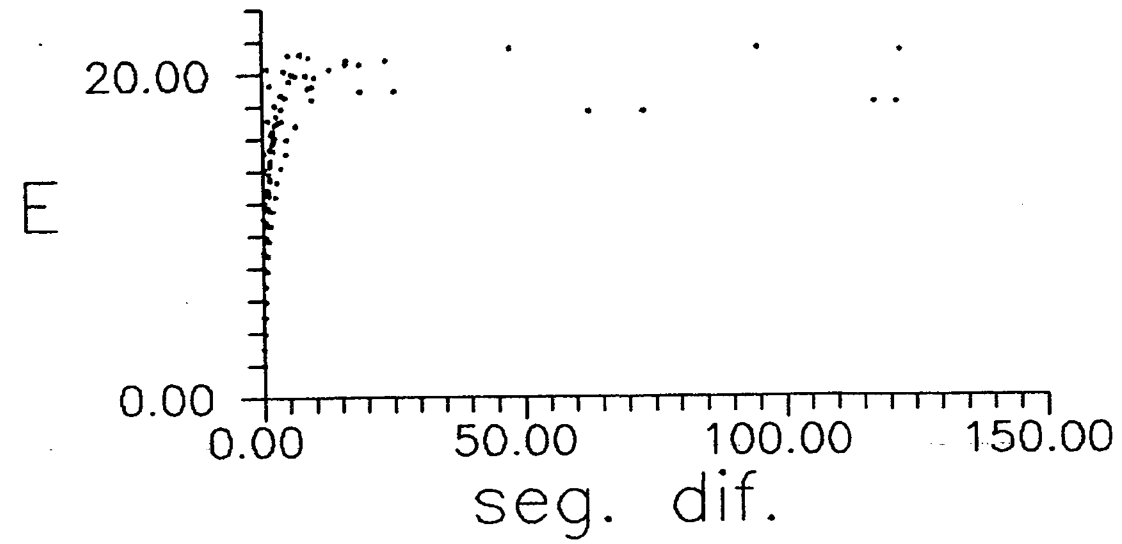


Figura 3. Gráfico da energia em função das segundas diferenças para 87 níveis pertencentes a simetria E_1 ($k_{max} = 68$, b=0.088 e δ b=0.001).

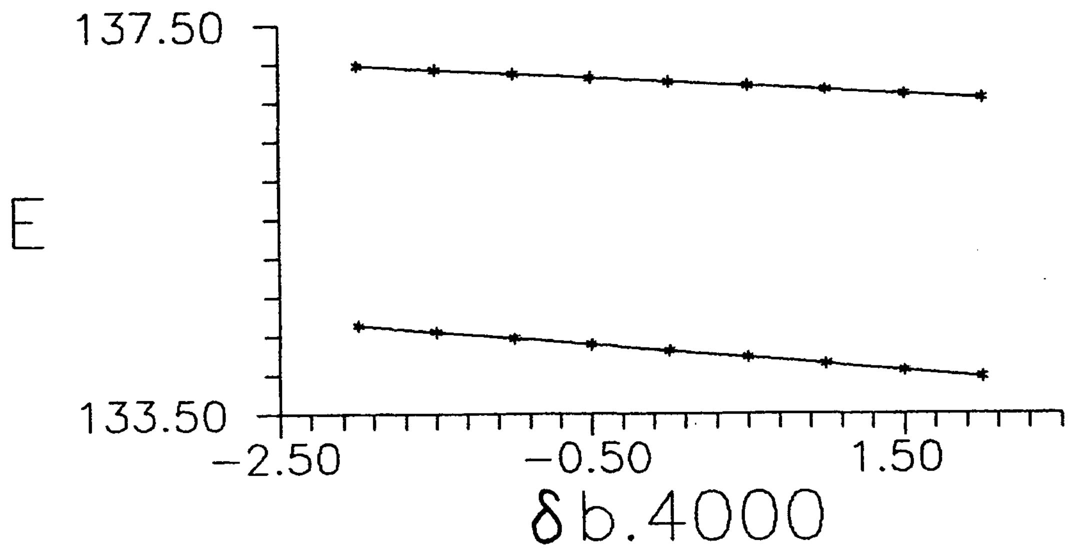


Figura 4. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.088 + \delta b$ para níveis 13 ($\Delta^2 E_{13} = 1.20$) e 14 ($\Delta^2 E_{14} = 1.31$) da simetria A_2.

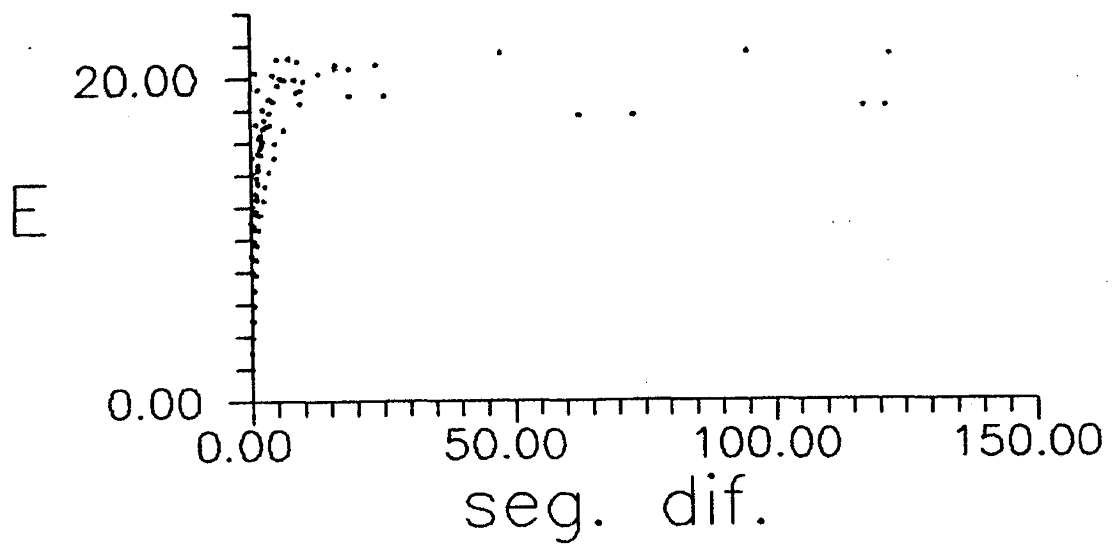


FIgura 3. Gráfico da energia em função das segundas diferenças para 87 níveis pertencentes a simetria E_1 ($k_{max} = 68$, b=0.088 e δ b=0.001).

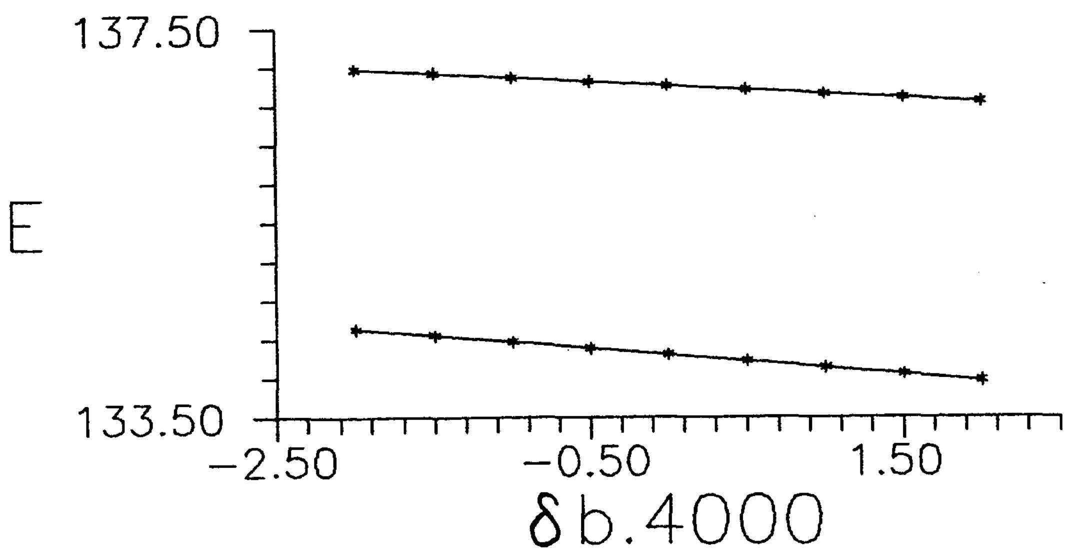


Figura 4. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.088 + \delta b$ para níveis 13 ($\Delta^2 E_{13} = 1.20$) e 14 ($\Delta^2 E_{14} = 1.31$) da simetria A_2.

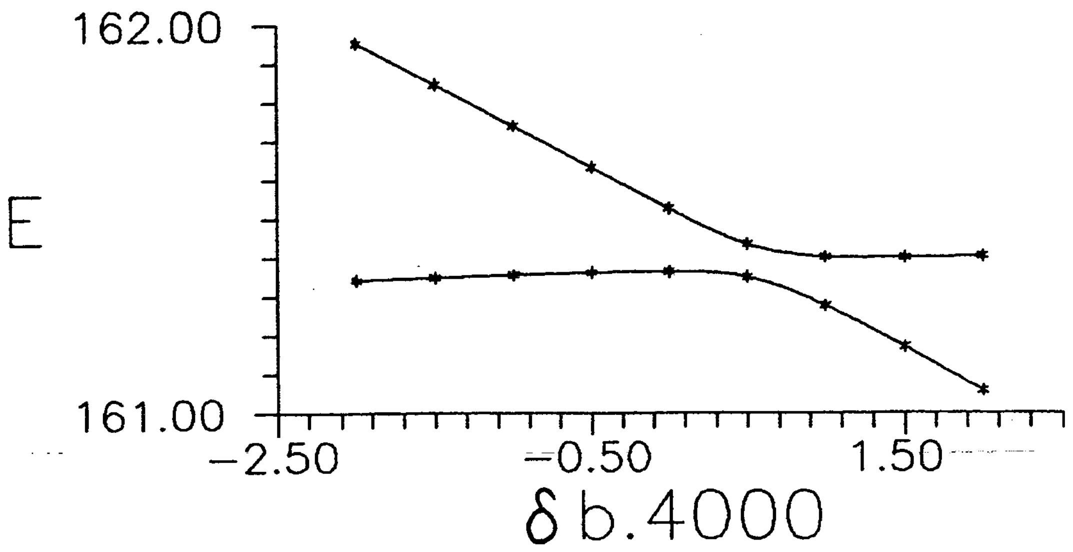


Figura 5. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.088 + \delta b$ para níveis 19 ($\Delta^2 E_{19} = 58.6$) e 20 ($\Delta^2 E_{20} = -55.0$) da simetria A_2.

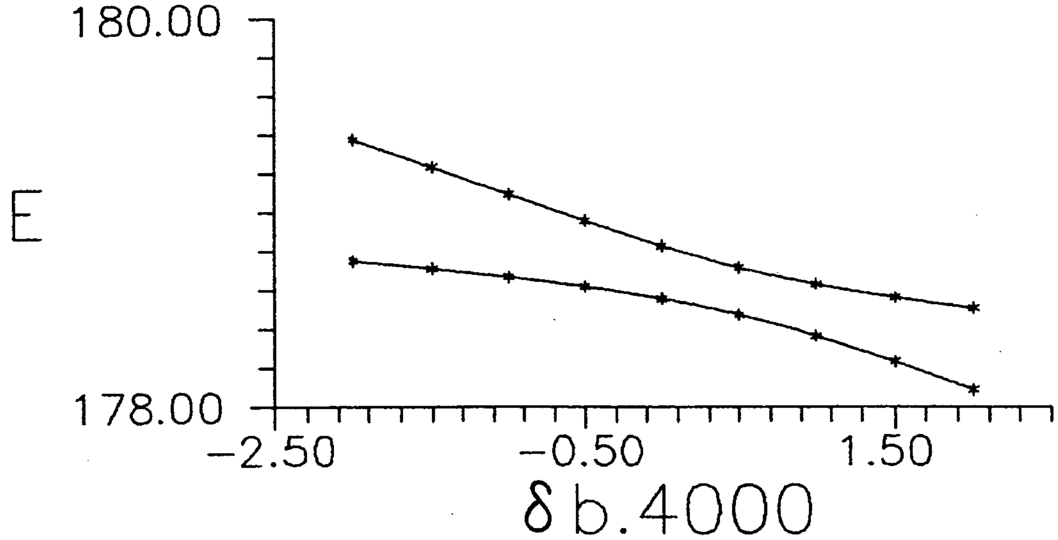


Figura 6. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.088 + \delta b$ para níveis 24 ($\Delta^2 E_{24} = 45.2$) e 25 ($\Delta^2 E_{25} = -38.2$) da simetria A_2.

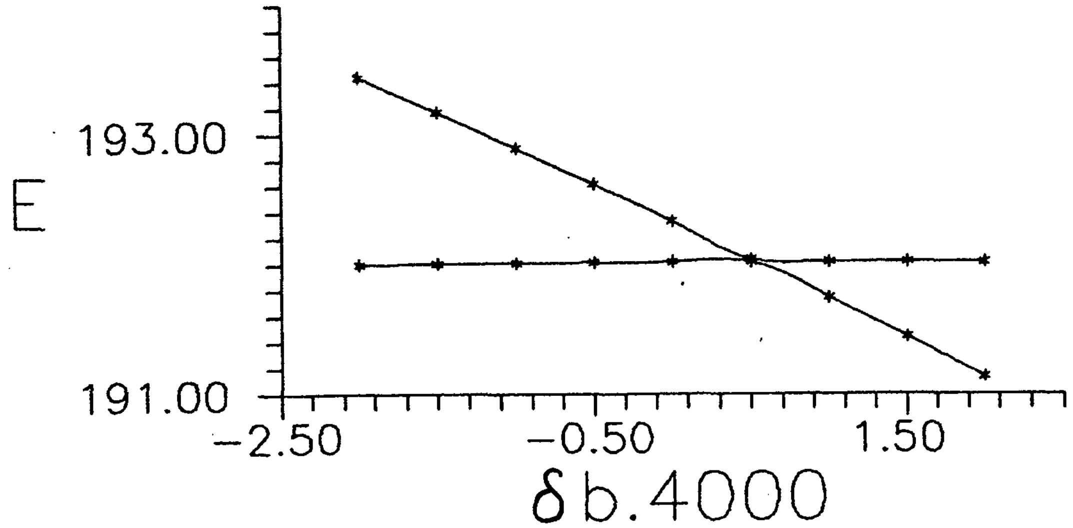


Figura 7. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.088 + \delta b$ para níveis 39 ($\Delta^2 E_{39} = 146.0$) e 40 ($\Delta^2 E_{40} = -131.8$) da simetria A_1.

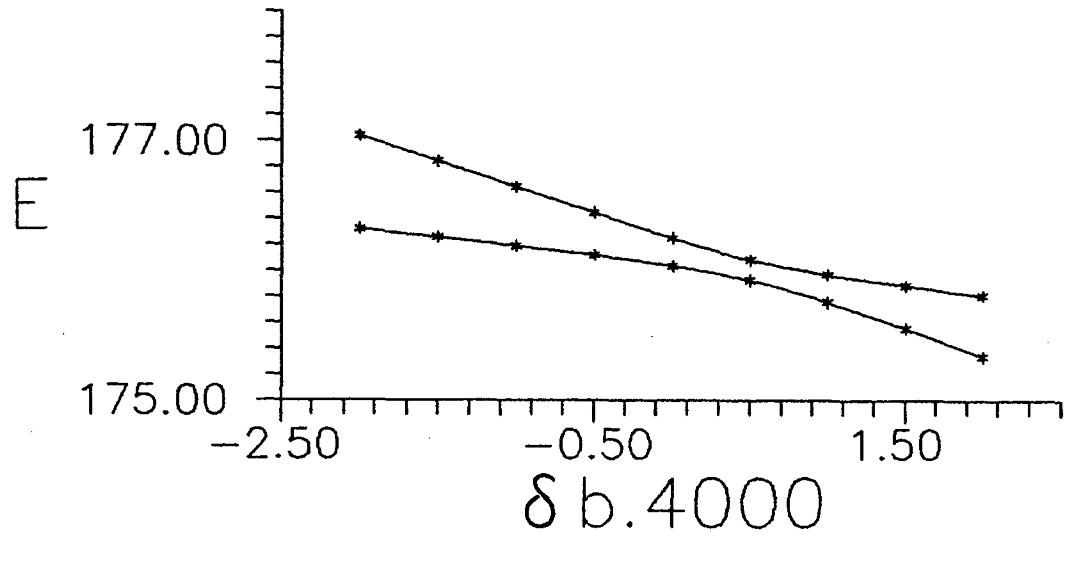


Figura 8. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.088 + \delta b$ para níveis 56 ($\Delta^2 E_{56} = 73.0$) e 57 ($\Delta^2 E_{57} = -62.6$) da simetria E_1.

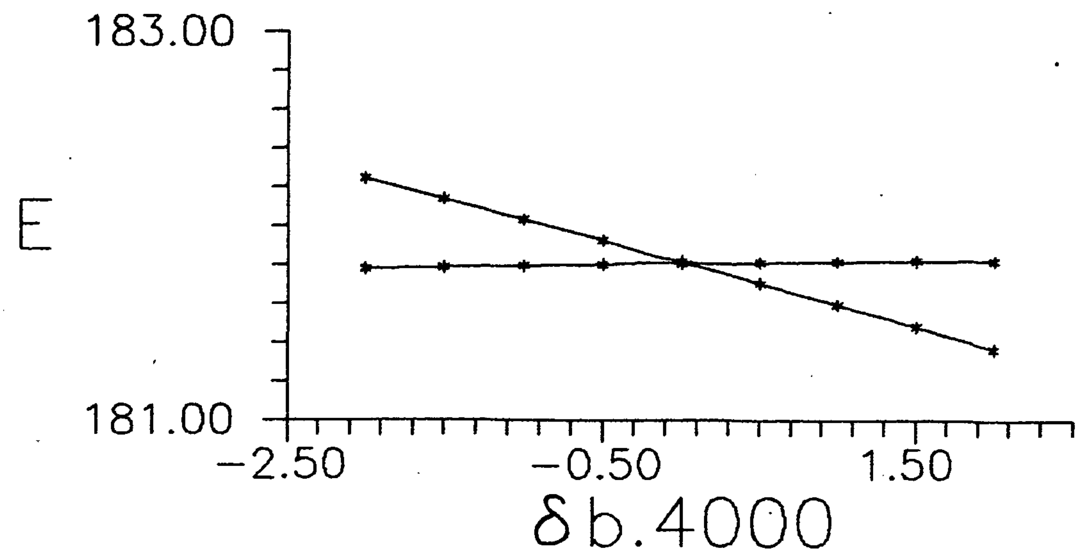


Figura 9. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.088 + \delta b$ para níveis 60 ($\Delta^2 E_{60} = 121.3$) e 61 ($\Delta^2 E_{61} = -117.1$) da simetria E_1.

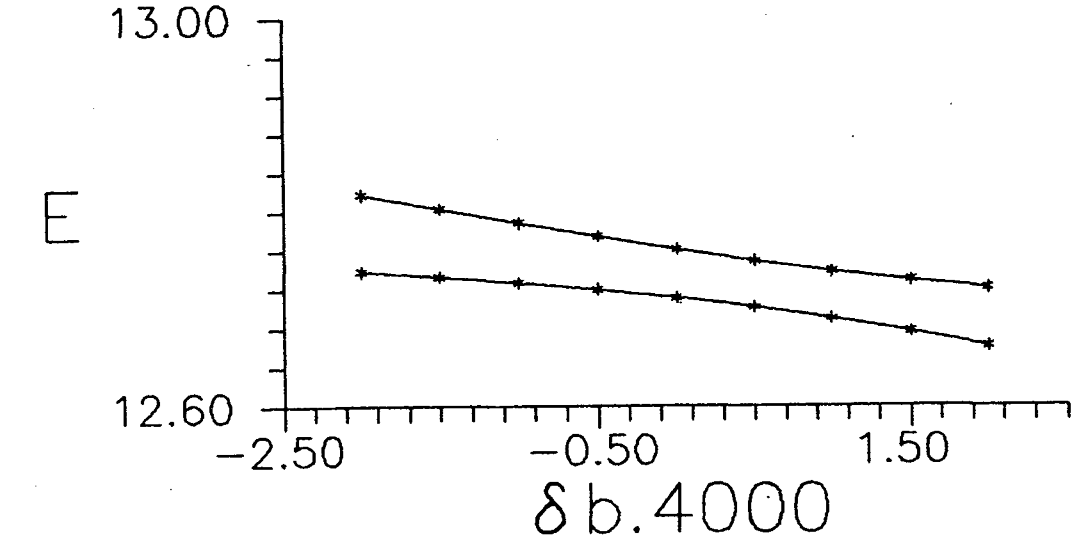


Figura 10. Gráfico da energia (E_i) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.1118 + \delta b$ para níveis 30 ($\Delta^2 E_{30} = 49.0$) e 31 ($\Delta^2 E_{31} = -35.0$) da simetria E_1.

3.2 O potencial totalmente ligado de Pullen e Edmonds

O seguinte hamiltoniano:

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + x^2 + y^2) + bx^2y^2 \tag{3.6}$$

foi sugerido por Pullen e Edmonds [10]. Caracteriza-se por ter todos os estados ligados (não há dissociação) podendo-se aumentar a ordem da matriz hamiltoniana até a obtenção de um grande número de autovalores convergidos com a precisão necessária, o que não é possível no hamiltoniano de Henon-Heiles.

3.2.1 As simetrias

Em coordenadas polares o hamiltoniano da equação (3.6) fica na forma:

$$H = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + r^2 - \frac{1}{2r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + br^4(\cos\theta\sin\theta)^2$$

que é invariante a 8 operações: identidade, rotações de $\pi/2, \pi$ e $3\pi/2$, reflexões sobre os eixos x e y, e reflexões sobre os eixos x e y mais rotações de $\pi/2$ que tem, respectivamente, a seguinte notação padrão : $E, C_4, C_2, C_4^3, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_1'$ e σ_2'. Essas operações geram o grupo C_{4v} cujos caracteres são mostrados na tabela (3.8).

C_{4v}	E	C_2	$2C_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	1	-1	1	-1
B_2	1	1	-1	-1	1
E	2	-2	0	0	0

Tabela 3.9. Tabela de caracteres do grupo C_{4v}.

Sendo $F(x,y)$ uma função arbitrária (nesse caso, uma autofunção do operador da equação (3.6)), pode-se decompô-la nas suas diferentes simetrias associadas às representações irredutíveis. Usando a equação (2.14) e a tabela (3.9), a parte dessa função pertencente a representação A_1, $f^{(A_1)}(x,y)$ é igual a:

$$\begin{aligned} f^{(A_1)}(x,y) = P^{(A_1)}F(x,y) &= \frac{l_{A_1}}{h}\sum_R \chi^{(A_1)}(R)^* P_R F(x,y) \\ &= \frac{1}{8}[F(x,y) + F(-x,-y) + F(y,-x) + F(-y,x) \\ &\quad + F(x,-y) + F(-x,y) + F(-y,-x) + F(y,x)], \end{aligned}$$

que é uma função simétrica em relação à permutação de coordenadas e/ou à reflexão em uma das coordenadas ou ambas as coordenadas. A função pertencente a representação irredutível A_2, $f^{(A_2)}$, é da forma:

$$f^{(A_2)}(x,y) = \frac{1}{8}[F(x,y) + F(-x,-y) + F(y,-x) + F(-y,x) - F(x,-y) - F(-x,y) - F(-y,-x) - F(y,x)],$$

ou seja, é uma função antissimétrica a reflexão em uma das coordenadas e à permutação das coordenadas e simétrica à reflexão de ambas as coordenadas. Conseqüentemente, é antisimétrica a permutação com reflexão em ambas as coordenadas e simétrica em relação a permutação com reflexão em uma das coordenadas pois o produto de funções de mesma paridade é uma função simétrica (par) e o produto de funções de paridade diferente é uma função antissimétrica (ímpar). Analogamente se obtém que:

$$f^{(B_1)}(x,y) = \frac{1}{8}[F(x,y) + F(-x,-y) - F(y,-x) - F(-y,x) + F(x,-y) + F(-x,y) - F(-y,-x) - F(y,x)],$$

é simétrica a reflexão em uma das coordenadas ou ambas as coordenadas e é antissimétrica a permutação e, também, a permutação com reflexão em uma ou em ambas as coordenadas e que:

$$f^{(B_2)}(x,y) = \frac{1}{8}[F(x,y) + F(-x,-y) - F(y,-x) - F(-y,x) - F(x,-y) - F(-x,y) + F(-y,-x) + F(y,x)],$$

é antissimétrica a reflexão em uma das coordenadas e simétrica a permutação das coordenadas ou reflexão em ambas as coordenadas. Conseqüentemente, é simétrica a permutação com reflexão em ambas as coordenadas e antissimétrica a permutação com reflexão em uma das coordenadas. A função pertencente a representação bidimensional E,

$$f^{(E)}(x,y) = \frac{1}{2}[F(x,y) - F(-x,-y)]$$

é antissimétrica em relação a reflexão em ambas as coordenadas.

Para base pode-se usar as autofunções do oscilador harmônico em coordenadas cartesianas:

$$F_{n_1 n_2}(x,y) = exp[-\frac{(x^2+y^2)}{2}]H_{n_1}(x)H_{n_2}(y) \tag{3.7}$$

em que H_n é polinômio de Hermite de ordem n ($H_n(-x) = H_n(x)$, se n é par e $H_n(-x) = -H_n(x)$, se n é ímpar) e $n_1, n_2 = \{0,1,2,\ldots\}$. Para $f^{(A_1)}$ cumprir a condição de invariância em relação a reflexão em uma ou em ambas as coordenadas deve-se limitar n_1 e n_2 a valores pares na equação (3.7), ou seja, $n_1, n_2 = \{0,2,4,\ldots\}$ Para satisfazer a condição de invariância a permutação deve, também, ter a forma:

$$f^{(A_1)}_{n_1 n_2}(x,y) = exp[-\frac{(x^2+y^2)}{2}][H_{n_1}(x)H_{n_2}(y) + H_{n_2}(x)H_{n_1}(y)]. \tag{3.8}$$

Como $f^{(A_1)}_{n_1 n_2}$ e $f^{(A_1)}_{n_2 n_1}$ correspondem ao mesmo estado se obtém ainda que $n_1 \geq n_2$ ou que $n_2 \geq n_1$. Para $f^{(A_2)}$ ser antissimétrica em relação a reflexão em uma das coordenadas e simétrica em relação a reflexão em ambas as coordenadas deve-se limitar n_1 e n_2 a valores ímpares na equação (3.7), ou seja, $n_1, n_2 = \{1, 3, 5, \ldots\}$. Para ser antissimétrica a permutação deve, também, ter a forma:

$$f^{(A_2)}_{n_1 n_2}(x,y) = exp[-\frac{(x^2+y^2)}{2}][H_{n_1}(x)H_{n_2}(y) - H_{n_2}(x)H_{n_1}(y)]$$

que implica em $n_1 > n_2$ ou $n_2 > n_1$. Do mesmo modo se obtém que:

$$f^{(B_1)}_{n_1 n_2}(x,y) = exp[-\frac{(x^2+y^2)}{2}][H_{n_1}(x)H_{n_2}(y) - H_{n_2}(x)H_{n_1}(y)]$$

com $n_1, n_2 = \{0, 2, 4, \ldots\}$ e $n_1 > n_2$ ou $n_2 > n_1$ e que:

$$f^{(B_2)}_{n_1 n_2}(x,y) = exp[-\frac{(x^2+y^2)}{2}][H_{n_1}(x)H_{n_2}(y) + H_{n_2}(x)H_{n_1}(y)]$$

com $n_1, n_2 = \{1, 3, 5, \ldots\}$ e $n_1 \geq n_2$ ou $n_2 \geq n_1$. A projeção de $F(x,y)$ na representação irredutível E deve ser o produto de polinômios de Hermite de paridade diferente, isto é:

$$f^{(E)}_{n_1 n_2}(x,y) = exp[-\frac{(x^2+y^2)}{2}]H_{n_1}(x)H_{n_2}(y)$$

onde $n_1, n_2 - 1 = \{0, 2, 4, \ldots\}$ e $n_1 - 1, n_2 = \{0, 2, 4, \ldots\}$. Utilizando as equações (2.11), (2.12) e a representação matricial da representação E, que pode ser obtida analogamente à representação do grupo $C_{3\nu}$ da seção (3.1.1), obtém-se que a parte de $f^{(E)}$ pertencente a primeira linha tem a forma:

$$f^{(E_1)}_{n_1 n_2}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2}}[f^{(E)}_{n_1 n_2}(x,y) + f^{(E)}_{n_2 n_1}(x,y)]$$

restringindo aos estados com $n_1, n_2 - 1 = \{0, 2, 4, \ldots\}$ ou $n_1 - 1, n_2 = \{0, 2, 4, \ldots\}$. Assim, os autovalores degenerados podem ser obtidos através da diagonalização da matriz hamiltoniana gerada pelos estados $F^{(E_1)}$ que tem a metade da dimensão da matriz hamiltoniana gerada pelos estados $f^{(E)}$.

3.2.2 Os elementos de matriz.

Para se obter a representação matricial do operador da equação (3.6) na base das funções de simetria $f^{(A_1)}_{n_1 n_2}$, $f^{(A_2)}_{n_1 n_2}$, $f^{(B_1)}_{n_1 n_2}$ e $f^{(B_2)}_{n_1 n_2}$ da seção anterior, é suficiente usar a relação de ortogonalidade para polinômios de Hermite:

$$(2^{n'+n}n'!n!\pi)^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-q^2)H_{n'}(q)H_n(q)dq = \delta_{n'n} \tag{3.9}$$

e a relação de recorência [10]:

$$qH_n(q) = nH_{n-1}(q) + \frac{1}{2}H_{n+1}(q)$$

Os elementos de matriz:

$$\langle n'_1 n'_2 \mid H \mid n_1 n_2 \rangle = \langle n'_1 n'_2 \mid H_0 \mid n_1 n_2 \rangle + b \langle n'_1 n'_2 \mid H_1 \mid n_1 n_2 \rangle,$$

onde H_0 é o oscilador harmônico não perturbado e $H_1 = r^4(\cos\theta \sin\theta)^2 = x^2 y^2$, ficam da forma:

$$\begin{aligned}
&\langle n'_1 n'_2 \mid H_0 \mid n_1 n_2 \rangle = (n_1 + n_2 + 1)\delta_{n'_1 n_1}\delta_{n'_2 n_2} \pm (n_1 + n_2 + 1)\delta_{n'_1 n_2}\delta_{n'_2, n_1} \\
&\langle n'_1 n'_2 \mid H_1 \mid n_1 n_2 \rangle = \\
&\quad \frac{1}{4}\{(2n_1 + 1)\delta_{n'_1 n_1} + [(n'_1 + 1)n_1]^{1/2}\delta_{n'_1 n_1 - 2} + [n'_1(n_1 + 1)]^{1/2}\delta_{n'_1 n_1 + 2}\} \\
&\qquad \{(2n_2 + 1)\delta_{n'_2 n_2} + [(n'_2 + 1)n_2]^{1/2}\delta_{n'_2 n_2 - 2} + [n'_2(n_2 + 1)]^{1/2}\delta_{n'_2 n_2 + 2}\} \\
&\quad \pm \frac{1}{4}\{(2n_2 + 1)\delta_{n'_1 n_2} + [(n'_1 + 1)n_2]^{1/2}\delta_{n'_1 n_2 - 2} + [n'_1(n_2 + 1)]^{1/2}\delta_{n'_1 n_2 + 2}\} \\
&\qquad \{(2n_1 + 1)\delta_{n'_2 n_1} + [(n'_2 + 1)n_1]^{1/2}\delta_{n'_2 n_1 - 2} + [n'_2(n_1 + 1)]^{1/2}\delta_{n'_2 n_1 + 2}\},
\end{aligned}$$

para $n'_1 \neq n'_2$ e $n_1 \neq n_2$ nas quais o sinal positivo é usado para as funções simétricas à permutação das coordenadas $f^{(A_1)}$ e $f^{(B_2)}$ e o sinal negativo para a funções antissimétricas $f^{(A_2)}$ e $f^{(B_1)}$ e:

$$\begin{aligned}
&\langle n'_1 n'_2 \mid H_0 \mid n_1 n_2 \rangle = C(n_1 + n_2 + 1)\delta_{n'_1 n_1}\delta_{n'_2 n_2} \\
&\langle n'_1 n'_2 \mid H_1 \mid n_1 n_2 \rangle = \\
&\quad \frac{C}{4}\{(2n_1 + 1)\delta_{n'_1 n_1} + [(n'_1 + 1)n_1]^{1/2}\delta_{n'_1 n_1 - 2} + [n'_1(n_1 + 1)]^{1/2}\delta_{n'_1 n_1 + 2}\} \\
&\qquad \{(2n_2 + 1)\delta_{n'_2 n_2} + [(n'_2 + 1)n_2]^{1/2}\delta_{n'_2 n_2 - 2} + [n'_2(n_2 + 1)]^{1/2}\delta_{n'_2 n_2 + 2}\}
\end{aligned}$$

com $C = 1$ se $n_1 = n_2$ e $n'_1 = n'_2$, e $C = \sqrt{2}$ se $n_1 \neq n_2$ e $n'_1 = n'_2$ ou $n_1 = n_2$ e $n'_1 \neq n'_2$. Esses elementos de matriz são usados no programa em FORTRAN do apêndice B.

3.2.3 Técnicas de diagonalização .

A tabela (3.10) mostra os níveis resultantes da diagonalização de todos estados $F_{n_1 n_2}(x,y)$ da matriz hamiltoniana de dimensão 361 que pode ser diagonalizada separadamente em: uma matriz de dimensão 90 dos estados de simetria E_1 $f^{(E_1)}_{n_1 n_2}$ (tabela (3.11)); uma matriz de dimensão 55 dos estados de simetria A_1 $f^{(A_1)}_{n_1 n_2}$ (tabela (3.12)); uma matriz de dimensão 45 dos estados de simetria B_1 $f^{(B_1)}_{n_1 n_2}$ (tabela (3.13)); uma matriz de dimensão 45 dos estados de simetria A_2 $f^{(A_2)}_{n_1 n_2}$ (tabela (3.14))e uma matriz de dimensão 55 dos estados de simetria B_2 $f_{k_1 k_2}^{(B_2)}$ (tabela (3.15)) para o mesmo n máximo ($n_{max} = n_{1max} = n_{2max}$) de 18. É importante ver que, utilizando o mesmo n_{max}, os autovalores correspondentes da tabela (3.10) e das tabelas (3.11) a (3.15) são iguais dentro da precisão do computador. Assim, a utilização das simetrias permite obter os mesmos resultados com bastante redução do tempo e da quantidade de memória necessários à diagonalização. Além disso, diminui a possibilidade de erros devido ao truncamento dos elementos de matriz. As matrizes de todos os estados e dos estados degenerados estão diagonalizadas com a rotina EISPACK da Harwel e as matrizes dos estados simétricos com a rotina EIGBS do IMSLIB (apêndice D) que utiliza o modo de armazenamento simétrico por bandas visto que estas matrizes tem um pequeno número de codiagonais não nulas e são simétricas. Todas as tabelas foram calculadas usando o programa em FORTRAN do apêndice B que foi executado no computador IBM 4341 da UFSC.

i	E_i	E_{i+50}	E_{i+100}
1	1.01206916070920	10.64244441707953	15.25040332421103
2	2.03543195644828	10.88775570317715	15.47737354910131
3	2.03543195644832	10.88775570317740	15.47737354910166
4	3.03582000871019	11.18857644960772	15.69096098330165
5	3.07964287537743	11.18929981480133	15.69262204460516
6	3.10414539928385	11.24842577384745	15.87782405473532
7	4.06622620839240	11.24842577384769	15.87782405473565
8	4.06622620839254	11.49292892839412	16.03067686776129
9	4.18277570914883	11.51214289925204	16.05748503283964
10	4.18277570914890	11.67817793612213	16.24638706183357
11	5.07533945328558	11.79205624499880	16.26546678891003
12	5.09938825662144	11.83716037822776	16.26546678891029
13	5.17194999070164	12.10299479522738	16.38171722322860
14	5.29414086361390	12.10649476878791	16.38801217571009
15	5.30206255789864	12.20473631958690	16.38801217571041
16	6.10353554995487	12.20473631958701	16.43605040665719
17	6.10353554995496	12.50432256276539	16.73501479737696
18	6.25011042660654	12.50438952887226	16.73673558355361
19	6.25011042660665	12.55103182997114	16.73673558355404
20	6.44069228055915	12.55103182997129	16.74041560344937
21	6.44069228055918	12.79734499616087	17.12173658928599
22	7.11729410223992	12.79734499616116	17.12173658928622
23	7.12680528815611	13.01702799606760	17.17334376441816
24	7.26821483161076	13.01702799606781	17.17348113195940
25	7.35155753751862	13.22014448301086	17.28002339334369
26	7.38766924079461	13.22030299055739	17.28007193688061
27	7.60721556170203	13.34272718333074	17.40202666980652
28	7.60903637583611	13.34272718333099	17.40202666980684
29	8.13924637980896	13.59601292991481	17.65621898047549
30	8.13924637980917	13.60223711228729	17.65621898047584
31	8.34587793485652	13.78008184997707	17.71884151616013
32	8.34587793485666	13.78008184997743	17.71890812385141
33	8.52097537104746	13.85582056348923	17.78597609058829
34	8.52097537104762	13.91862699412597	17.78640991083180
35	8.79934035323474	14.02412109626587	18.01711890407705
36	8.79934035323485	14.22754696244529	18.01711890407743
37	9.15483587120650	14.23543467186091	18.19356072637664
38	9.15771362416306	14.23543467186112	18.20244668667506
39	9.38057513498118	14.24477887331356	18.31301950521623

40	9.42649084341350	14.60025928391247	18.31301950521647
41	9.51661011726292	14.60110146159773	18.48687737795161
42	9.68593392759255	14.64584296276851	18.48687737795217
43	9.69866889848704	14.64584296276872	18.48718812815487
44	10.01293387507449	14.96239742951316	18.56112292322615
45	10.01329443668775	14.96239742951355	18.67973900983012
46	10.17278891779375	15.07485254062356	18.83038614107330
47	10.17278891779406	15.07486077615654	18.83038614107348
48	10.45063037044771	15.19138668310817	18.90614262659996
49	10.45063037044804	15.19138668310837	18.92930824987576
50	10.64244441707932	15.25036837270946	19.06699721576802

Tabela 3.10. Todos estados: b=0.05, dim=361, $n_{max} = 18$. Os menores 150 autovalores resultantes da diagonalização da matriz gerada por todos os 361 estados obtidos para um n máximo de 18.

i	E_i	E_{i+20}	E_{i+40}
1	2.03543195644758	13.78008184997769	19.88950257701321
2	4.06622620839180	14.23543467186137	20.20173747265445
3	4.18277570914818	14.64584296276893	20.63076359290418
4	6.10353554995447	14.96239742951378	21.03099219463271
5	6.25011042660619	15.19138668310896	21.16535589156889
6	6.44069228055886	15.47737354910214	21.67029986483116
7	8.13924637980889	15.87782405473606	21.81265227729752
8	8.34587793485645	16.26546678891101	21.89616103816178
9	8.52097537104739	16.38801217571092	22.23047771284363
10	8.79934035323470	16.73673558355468	22.46605895533344
11	10.17278891779394	17.12173658928691	22.84163829955927
12	10.45063037044796	17.40202666980745	23.32210643565404
13	10.64244441707951	17.65621898047626	23.91194879589055
14	10.88775570317745	18.01711890407786	24.48529218691613
15	11.24842577384784	18.31301950521703	24.62215287889103
16	12.20473631958711	18.48687737795237	24.84116947560185
17	12.55103182997146	18.83038614107420	25.01509262992994
18	12.79734499616129	19.06699721576881	25.29227143071124
19	13.01702799606800	19.29378404580529	25.65897252190857
20	13.34272718333131	19.62690740242170	26.13618862937578

Tabela 3.11. Simetria E_1: b=0.05, dim=90, n_{max}=18. Os primeiros 60 níveis resultantes da diagonalização da matriz hamiltoniana gerada pelos 90 estados de simetria E_1 obtidos para um n máximo de 18.

i	E_i	E_{i+20}	E_{i+40}
1	1.01206916070787	17.71890812385157	29.92694959649760
2	3.07964287537618	18.19356072637634	30.69890223660379
3	5.07533945328470	18.67973900982993	31.94635547377248
4	5.30206255789777	19.31415593783557	33.35470871925517
5	7.12680528815557	19.32959495440440	34.26245770143776
6	7.60721556170156	20.37105023490782	35.15039621442003
7	9.15483587120631	20.43199552098858	37.55720899722801
8	9.51661011726287	21.11768442020276	38.49955784842324
9	10.01329443668762	21.96305881438731	39.13337324579969
10	11.18929981480114	22.76021055988071	43.96422638561977
11	11.79205624499881	23.20935161246819	44.66590436897098

12	12.50432256276548	23.35799663089751	51.22365637459123
13	13.22014448301074	23.79336543021218	52.07567401973040
14	13.85582056348924	24.69043603412192	61.88605704267034
15	14.24477887331362	26.04930444497989	75.55000109919077
16	15.07486077615679	26.18575095174972	
17	15.25040332421094	26.68573418149558	
18	16.05748503283981	27.55049515769941	
19	16.73501479737704	28.95368691466651	
20	17.28002339334339	29.21890582617574	

Tabela 3.12. Simetria A_1: b=0.05, dim=55, n_{max}=18, nc=10. Todos os níveis de energia da matriz hamiltoniana com estados de simetria A_1 para n máximo de 18.

i	E_i	E_{i+15}	E_{i+30}
1	3.03582000870922	17.17348113195982	26.39989477179894
2	5.09938825662092	17.28007193688087	27.06089231487078
3	7.11729410223956	18.20244668667547	28.17479374591262
4	7.38766924079430	18.90614262660018	29.56773235305541
5	9.15771362416298	19.32844667823283	30.29544458801862
6	9.68593392759244	19.81747705314739	31.21860076394947
7	11.18857644960786	20.36900299510250	32.91320510276150
8	11.67817793612235	20.96908889740672	33.81663459227113
9	12.10649476878825	21.50603544929226	34.66049470117075
10	13.22030299055765	22.52888033247728	38.02007659411945
11	13.91862699412641	22.76090916010256	38.93206052344845
12	14.60025928391294	23.44547519337673	43.51916926931396
13	15.25036837270977	24.18384510950565	44.58367628225188
14	16.03067686776166	25.30789651237229	52.00535102824739
15	16.43605040665762	26.07946410571905	61.74745626955150

Tabela 3.13. Simetria B_1: b=0.05, dim=45, n_{max}=18, nc=9. Todos os níveis da matriz hamiltoniana com estados de simetria B_1 para $n_{max} = 18$.

i	E_i	E_{i+15}	E_{i+30}
1	5.17194999070100	19.81703778942621	29.31652425965753
2	7.35155753751736	19.87448546773565	29.99077159352404
3	9.38057513424852	20.75228668941232	31.10296553774203
4	9.69866889809967	21.49538733102122	32.59867331599209
5	11.51214286576653	22.08049617530434	33.41250291644918
6	12.10299477479303	22.52831718074078	34.29780967000955
7	13.59600973325009	23.00192672939160	36.29952156460265
8	14.02411722817588	23.49714445604105	37.20016348408477
9	14.60110095293041	24.16162722570786	38.03749957255252
10	15.69247590204763	25.30372994915045	41.90366546006665
11	16.38159088828322	25.62300871361133	42.83412844964430
12	17.17332830479335	26.17448764933959	48.02100554120964
13	17.78071394756519	26.94313386734088	49.14150544986286
14	18.48367438218963	28.14878655253823	57.28892177530283
15	18.92812384498106	28.84396304244435	67.86699820470526

Tabela 3.14. Simetria A2: b=0.05, dim=45, n_{max}=18, nc=9.

i	E_i	E_{i+20}	E_{i+40}
1	3.10414539928286	20.43170221804617	33.00467129210145
2	5.29414086361313	20.72086867556435	33.81794531261566
3	7.26821483160494	21.17437653234155	34.99308080579117
4	7.60903637583472	21.96132233581765	36.73609885599102
5	9.42649084317362	22.08092593584439	37.66002123548473
6	10.01293387500901	23.01225704113830	38.42488433443887
7	11.49292887213253	23.20941253998690	41.45311622232483
8	11.83716032251714	23.73700866886025	42.36183676963777
9	12.50438952639775	24.67887388329078	42.96388353765413
10	13.60223438931754	25.61710188371855	48.43767870209981
11	14.22754463126924	25.99830236076857	49.19787977634322
12	15.07485243164986	26.04854700835801	56.42893759437266
13	15.69081018537964	26.51205236685595	57.34539513376152
14	16.24623589344266	27.48579377138500	67.99461306764279
15	16.74037757507735	28.94782647650327	82.71931338197630
16	17.71883323767259	29.06285646221032	
17	17.78117172669927	29.61935573936743	
18	18.55769419891221	30.47221161188859	
19	19.31365527299121	31.91544125408923	
20	19.87399653021411	32.21006022946211	

Tabela 4.15. Simetria B2: b=0.05, dim=55, n_{max}=18, nc=10.

3.2.4 As segundas diferenças .

Pullen e Edmonds [10] estudaram classicamente este hamiltoniano. Para energias menores que E=15 o movimento é totalmente regular [10] e em energias acima de E=50 o movimento torna-se totalmente caótico, ou seja, ocorre a transição do regime regular para o caótico no intervalo de energias $11 \leq E \leq 50$. É interessante estudar o espectro quântico neste intervalo de transição. Na tabela (3.15) estão colocados os resultados para uma modificação $\delta b = 0.00125$ no parâmetro de perturbação $b = 0.05$ para os estados de simetria A_1.As segundas diferenças para as simetrias A_2,B_1 e B_2 estão contidas no apêndice F. Utiliza-se somente os estados não degenerados diagonalizando-se separadamente os matrizes hamiltonianas dos estados pertencentes às representações A_1, A_2, B_1 e B_2 visto que os estados degenerados (simetria E) requerem maior espaço de armazenamento no computador para cada n_{max} do que os estados não degenerados. De cada matriz diagonalizada com dimensão aproximada de 600 ($n_{max} = 68$) 180 níveis convergem de no mínimo 8 casas decimais (últimos 10 níveis) até 13 casas decimais (primeiros 150 níveis) quando comparados com os níveis de dimensões maiores. A diagonalização de todos os estados do hamiltoniano tornaria o trabalho muito demorado ou talvez o impossibilitaria devido aos erros de truncamento dos elementos de matriz. As segundas diferenças para as simetrias A_2,B_1 e B_2 estão contidas no apêndice F. Pullen e Edmonds [10] usaram matrizes com dimensão em torno de 300 e obtiveram uma precisão de 4 casas decimais para os maiores autovalores, ou seja, a metade da precisão obtida aqui neste trabalho para os autovalores correspondentes.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	1.0123607291108	1.0120691607073	1.0117771330604	0.04538
2	3.0814643751836	3.0796428753748	3.0778142995191	0.22977
3	5.0771147146533	5.0753394532831	5.0735595453319	0.09155
4	5.3087568213230	5.3020625578961	5.2953346498977	0.63456
5	7.1296006569537	7.1268052881539	7.1239956027443	0.20088
6	7.6201292559369	7.6072155616996	7.5942183288405	1.09815
7	9.1582585944869	9.1548358711770	9.1513958329882	0.18913
8	9.5280741301799	9.5166101170682	9.5050905034078	0.58425
9	10.0341757539485	10.0132944366738	9.9922572101802	1.55702
10	11.1933697589368	11.1892998132580	11.1852062181942	0.21136
11	11.8085772226488	11.7920562371894	11.7754204566874	0.97349
12	12.5344749326593	12.5043225619697	12.4739201101242	1.99996
13	13.2248182400956	13.2201443532534	13.2154418747627	0.21627
14	13.8744830806861	13.8558193350175	13.8370499020840	0.76276
15	14.2702004309721	14.2447785127278	14.2191665550418	1.33410
16	15.1154523606121	15.0748607533283	15.0339034321913	2.42598
17	15.2556451845836	15.2503954189271	15.2451139167681	0.20810
18	16.0793635690570	16.0574410714616	16.0353645721271	0.95907
19	16.7690872821464	16.7350011215946	16.7006154750888	1.78958
20	17.2853954724100	17.2795894574302	17.2737476853661	0.20693
21	17.7709649343109	17.7189072444534	17.6663507466485	2.81512
22	18.2167900984426	18.1920087715226	18.1670500569387	0.97509
23	18.7142899237862	18.6790987659198	18.6436735871070	1.25285
24	19.3139907205704	19.3063323579012	19.2699714928657	148.66885
25	19.3598431653225	19.3168147584083	19.3020298429159	-146.21195
26	20.3711731350959	20.3437993171878	20.3161707482716	1.25223
27	20.4963227960413	20.4319067188465	20.3668881390737	2.94883
28	21.1481440413600	21.1065028764840	21.0644900208362	1.76102
29	21.3429900716744	21.3360114082868	21.3290202222736	0.05869
30	22.0156955787095	21.9604295168791	21.9045886918436	2.61727
31	22.5135083160566	22.4835692312273	22.4534032582985	1.00913
32	23.2837296811037	23.2085016685868	23.1304314105531	12.24657
33	23.2982814473522	23.2499070438206	23.2029527020670	-6.10782
34	23.3715814027418	23.3636563173657	23.3559409135398	-0.89747
35	23.7926524768572	23.7390378902365	23.6849771676939	1.87933
36	24.6503055552821	24.6170642471160	24.5810642702112	11.20633
37	24.7418418455229	24.6756385700770	24.6112011491213	-7.15627
38	25.3975058328173	25.3893814486696	25.3811749005317	0.32362
39	25.6161006899062	25.5655277946331	25.5145820790759	1.45829
40	26.1392404055821	26.0477215496706	25.9551717690088	3.95783
41	26.4336255299726	26.3702553893135	26.3062369831134	2.45832
42	26.7890820885109	26.7541869862666	26.7190529411871	0.89310
43	27.4254853372826	27.4167355570518	27.3634868466918	162.30572
44	27.5232268826680	27.4438501683218	27.4079941603693	-158.58091
45	27.8488855004105	27.7934023637742	27.7374943073261	1.52885
46	28.4541129288480	28.3862387882495	28.3177871341522	2.03448
47	28.9175777297377	28.8805187156636	28.8358232349683	26.44158
48	29.0486933818103	28.9432279935380	28.8434846035955	-19.76973
49	29.1745010488142	29.0982696049360	29.0216521104811	1.32671
50	29.4538945106822	29.4442987218765	29.4347591954210	-0.19108
51	30.0952616942622	30.0363821493921	29.9769040297755	1.99283
52	30.3703023413902	30.2775017516296	30.1836263009740	3.55003
53	30.9780170631612	30.9115177117076	30.8406737642837	14.05494
54	31.0694948949902	31.0223896413628	30.9784737329524	-10.28079
55	31.4836812303593	31.4728787554762	31.4622627583721	-0.59250
56	31.9426853369391	31.8523485943215	31.7541832649059	24.57774
57	32.0261855719405	31.9080650321179	31.7952359176252	-16.58335
58	32.3347349076802	32.2713064120034	32.2073954827658	1.49493

59	33.1483026418089	33.0964263482967	33.0245954658407	60.29228
60	33.2338900285580	33.1495955434551	33.0675751827303	-6.86019
61	33.2937536318680	33.2016741945785	33.1243774483121	-44.52393
62	33.5166003507282	33.5037657359865	33.4914569134417	-1.56935
63	33.8065587037744	33.7167716514980	33.6262019043212	2.32138
64	34.5478165139844	34.4815856666833	34.4143705242130	2.85455
65	34.8057547593163	34.7053186057877	34.6038346321996	3.01919
66	35.0433410220304	34.9059401551492	34.7670198917070	4.35283
67	35.2798713717541	35.2397168154487	35.1980799607622	4.20633
68	35.5530569694824	35.5335571299341	35.4746695702692	110.84654
69	35.6528139512497	35.5698267236411	35.5266910984101	-112.03766
70	36.2149308569377	36.0950033507889	35.9733246520585	4.85162
71	36.5454418448401	36.4483616944862	36.3495023881875	4.88131
72	36.7938291132078	36.7210712847161	36.6483487163097	-0.09602
73	37.3866714477410	37.3499601646525	37.3104184516828	7.57813
74	37.6078111349821	37.5684974521619	37.4560360602272	194.70491
75	37.6809089063833	37.5852752703268	37.5636799860400	-196.98765
76	37.9811101056291	37.8860300198709	37.7892070358585	4.60037
77	38.1148551212865	37.9610102923005	37.8066080822447	1.46830
78	38.6650890553866	38.5596197839387	38.4525846810938	4.06081
79	38.9846317956392	38.9117590062328	38.8380156086320	2.23739
80	39.2063205908228	39.0739176109180	38.9391606671262	6.02439
81	39.4434588291294	39.3293526053656	39.2120767504634	8.05920
82	39.4738995115705	39.4416642480449	39.4080205668196	3.57089
83	39.6889257994757	39.6526468487785	39.6208139407231	-11.21247
84	40.2788239394126	40.1826324898403	40.0852823237376	2.88363
85	40.6558465340625	40.5278528662018	40.3982959968567	3.85710
86	41.1276754811736	41.0493836384640	40.8911895666777	194.64903
87	41.2352064215705	41.0644959502548	40.9665464648736	-177.18709
88	41.3517935359244	41.2460940066349	41.1413704207383	-2.36615
89	41.5334987507103	41.5091968864206	41.4830916221465	4.34458
90	41.8017516542815	41.7518639228063	41.7057937260335	-9.14339
91	42.1966532200272	42.0625193272640	41.9233329116355	12.01194
92	42.3602584319858	42.2222764648981	42.0847535168455	-1.08715
93	42.6295800449139	42.5232586066589	42.4167874816000	0.35201
94	43.3263489426135	43.2544085450735	43.1767995278385	13.10530
95	43.5495237045302	43.4401811455950	43.3142147505604	38.26834
96	43.5982551098699	43.5526612307275	43.4617302790336	104.09713
97	43.7382184895317	43.6107601522455	43.5437120760494	-138.52146
98	43.9406480479525	43.8785048528144	43.8196202778239	-7.42646
99	44.2619365690732	44.1299383606885	43.9963506942332	3.60177
100	44.4030127617035	44.2148409124942	44.0244206135397	5.08528
101	44.8668399194375	44.7626403946216	44.6567101796333	3.86637
102	45.2241628864998	45.0809903206838	44.9345715797583	7.20076
103	45.4431617247929	45.2794664141117	45.1146331509995	2.51318
104	45.4842323624381	45.4294326176735	45.3656222746130	19.83427
105	45.6516952165758	45.6151633028170	45.5853561050546	-14.74228
106	46.0539672243789	45.9599918669331	45.8492737664627	36.42895
107	46.1558937159475	46.0528961785548	45.9677959737874	-38.86256
108	46.6778535073231	46.5229547783914	46.3655496665457	5.38741
109	47.0078545930197	46.8839982709040	46.7552982803936	10.33118
110	47.2762922739174	47.1513667983406	47.0273039611745	-1.82951
111	47.5675488795757	47.4095976663693	47.2010034233515	106.82021
112	47.6154093225007	47.5376787842271	47.4984654950857	-81.02467
113	47.7838273723667	47.7217792831172	47.6676261569117	-16.54373
114	48.1655764880156	48.0208782386628	47.8717316000418	9.26345
115	48.2594693307487	48.1756093416852	48.0938534858726	-4.36763
116	48.5193613234683	48.3539126434344	48.1791439066006	19.27467
117	48.6161078103395	48.4568826033581	48.3055855862411	-16.36133

118	49.2326732536634	49.0994033049212	48.9598767984214	12.74264
119	49.4729248573218	49.3569929316092	49.2386855597637	4.81279
120	49.6180032469089	49.5836423557307	49.4131270613728	274.59540
121	49.7533850188860	49.5937603253715	49.5675508528819	-269.01614
122	49.9407404895346	49.8649865692494	49.7826039415195	13.29331
123	50.1457039811475	49.9844178071645	49.8312318086338	-16.20540
124	50.4492490613330	50.3579276229379	50.2685770462374	-3.91371
125	50.8582881185288	50.6467550522995	50.4201139546514	29.83021
126	50.8721500206098	50.7228542588177	50.5836294586612	-19.85488
127	51.3020927052234	51.1334705588804	50.9626210792937	4.35592
128	51.5629555527226	51.4761037305155	51.3424178105088	90.98221
129	51.6664662695545	51.5488513324960	51.3741041967896	110.83118
130	51.7510834329601	51.6297838345408	51.6016930255310	-180.53298
131	52.0138693168610	51.8904773502210	51.7547354862840	23.79993
132	52.1802825882920	52.0697433399776	51.9741661070737	-28.73457
133	52.6650372241515	52.5611978636818	52.4421668057117	28.90288
134	52.7947684653914	52.6242716981935	52.4665375952797	-24.25243
135	53.0722968597288	52.9032176474038	52.7309264822814	6.07138
136	53.3763215552967	53.2167634957000	53.0572606155535	-0.10369
137	53.6416985726411	53.6175621732098	53.5762259330894	32.07874
138	53.8570029478430	53.7632897927441	53.6788788720333	-17.30220
139	54.1635740379398	53.9241723222362	53.6813956501146	6.25871
140	54.2040391715064	54.0591233134118	53.8996073613442	27.00764
141	54.3207115621696	54.2019969684312	54.0938874119024	-19.56577
142	54.5965991104230	54.4225219029172	54.2523226000005	-7.12555
143	54.9026331865427	54.7589491967397	54.5367977873789	143.29607
144	54.9788158912778	54.7871473750654	54.6732411051310	-141.93520
145	55.0983634381808	54.9229213013754	54.7448870743740	4.71951
146	55.5583464367114	55.4142432665131	55.2655608592204	8.26365
147	55.6734220150212	55.6537727221191	55.5644464158601	125.19729
148	55.9366511264121	55.7554884997762	55.6366675228996	-111.81258
149	56.0634244916397	55.9646072690949	55.8629507507170	5.07338
150	56.3352992164266	56.1323026341064	55.9315228860104	-3.94930
151	56.4760316855049	56.3730781726611	56.2723705881419	-3.98404
152	56.9425626895936	56.7805566335473	56.6151490706067	5.99062
153	57.1660479635510	57.0340182339689	56.9053865870214	-5.95799
154	57.4768752351419	57.2365375934239	56.9765255132731	34.37391
155	57.5199806352550	57.3045788200737	57.1018082858778	-22.04236
156	57.6847146906369	57.5887594083637	57.4359913770904	98.65250
157	57.7503334175559	57.6810566264468	57.6601201030466	-83.80614
158	58.1174597255116	57.9636746822470	57.7580413915103	89.44955
159	58.2486535262976	58.0278804791841	57.8342747991313	-46.81778
160	58.3287555459872	58.1959196444073	58.0828803531812	-34.01718
161	58.7197370137058	58.6008020656001	58.4833289044208	-2.49448
162	58.9569214808644	58.7695582307256	58.5799392180524	3.83832
163	59.3312760654454	59.1505684021190	58.9521987995730	29.85929
164	59.4407053279769	59.2752853094048	59.1187921878286	-15.06007
165	59.6467581662004	59.4450079088361	59.2483926679397	-8.63826
166	59.7133790176215	59.6968670691071	59.6743659421524	10.03265
167	60.0226151164646	59.8760806272218	59.7242229895873	8.89028
168	60.2898300067730	60.1533422299897	60.0028711321571	23.24612
169	60.5110364457290	60.3729622561726	60.2316663887467	5.33629
170	60.6856416953139	60.4730995892798	60.2749684581014	-23.83039

Tabela (3.16). Simetria A_1, b=.05, n_{max} = 68, δ b=.00125. Segundas diferenças para estados de simetria A_1.

Pode-se observar nesta tabela que o número de grandes segundas diferenças aumenta com o aumento da energia. É possivel analizar melhor este aumento classificando as segundas diferenças em três categorias: baixa, com módulo da menor que 0.95; média, com módulo maior ou igual a 0.95 e menor que 5.0; alta, com módulo maior que 5.0. A tabela 3.17 mostra o número de segundas diferenças (alta,média e baixa) em intervalos iguais de energia para os autovalores de simetria A_1, A_2, B_1 e B_2. Também estão incluídos os resultados obtidos por Pullen e Edmonds [10] que foram publicados com uma classificação indefinida.

Intervalo de energia	baixa	media	alta	baixa	media	alta
11-13	6	5	0	6	5	0
13-15	6	5	0	6	5	0
15-17	5	8	0	5	8	0
17-19	4	11	0	5	10	0
19-21	1	9	5	1	11	3
21-23	2	8	6	3	9	4
23-25	2	9	6	2	9	6
25-27	3	14	4	2	17	2
27-29	0	7	13	2	8	11
29-31	2	11	5	2	11	5
31-33	4	10	9	3	11	9
33-35	2	15	8	0	14	10
35-37	0	11	14	1	8	16
37-39	0	11	16	0	6	21
39-41	1	9	15	0	6	19
41-43	2	6	20	1	5	22
43-45	2	5	24	0	7	24
45-47	0	6	22	0	2	26
47-49	1	8	24	0	2	26
49-51	1	2	30	0	3	30
51-53	0	2	25			
53-55	0	4	27			

Tabela 3.17. Número de autovalores com segunda diferença baixa, média ou alta em intervalos iguais de energia. Os resultados do lado direito da tabela foram obtidos por Pullen e Edmonds [10].

As figuras (11) a (14) contém os gráficos da energia em função das segundas diferenças para os primeiros 180 níveis das quatro simetrias unidimensionais. Em todas as simetrias o número de grandes segundas diferenças aumenta a medida que aumenta a energia, ou seja, aumentam os autovalores sensíveis a mudanças na perturbação. As figuras (15) a (19) mostram os gráficos da energia em função do parâmetro de perturbação para alguns dos pares de grandes segundas diferenças da simetria A_1. Observa-se os cruzamentos evitados para todas as grandes segundas diferenças e, na figura (19), um triplo cruzamento evitado. Também pode-se notar que os cruzamentos evitados são muito mais evidentes quanto maior o módulo das segundas diferenças . A figura 20 mostra o gráfico de dois níveis com pequenas segundas diferenças . Vê-se claramente que não ocorre cruzamento evitado entre níveis com pequenas segundas diferenças .

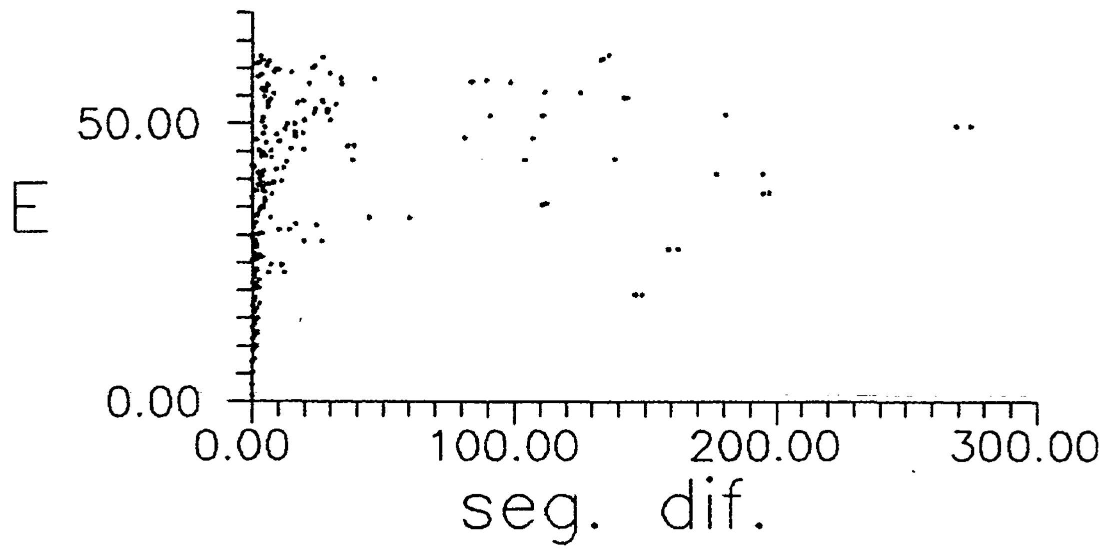


Figura 11. Gráfico da energia em função das segundas diferenças para 180 níveis pertencentes a simetria A_1 ($n_{max} = 68$, b=0.05 e δ b =0.00125).

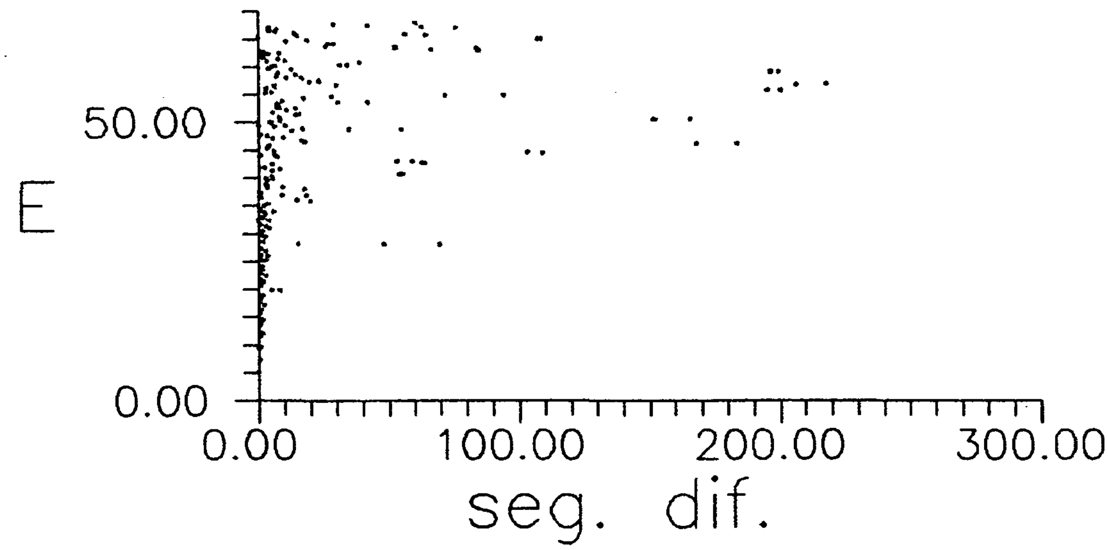


Figura 12. Gráfico da energia em função das segundas diferenças para 180 níveis pertencentes a simetria A_2 ($n_{max} = 68$, b=0.05 e δ b =0.00125).

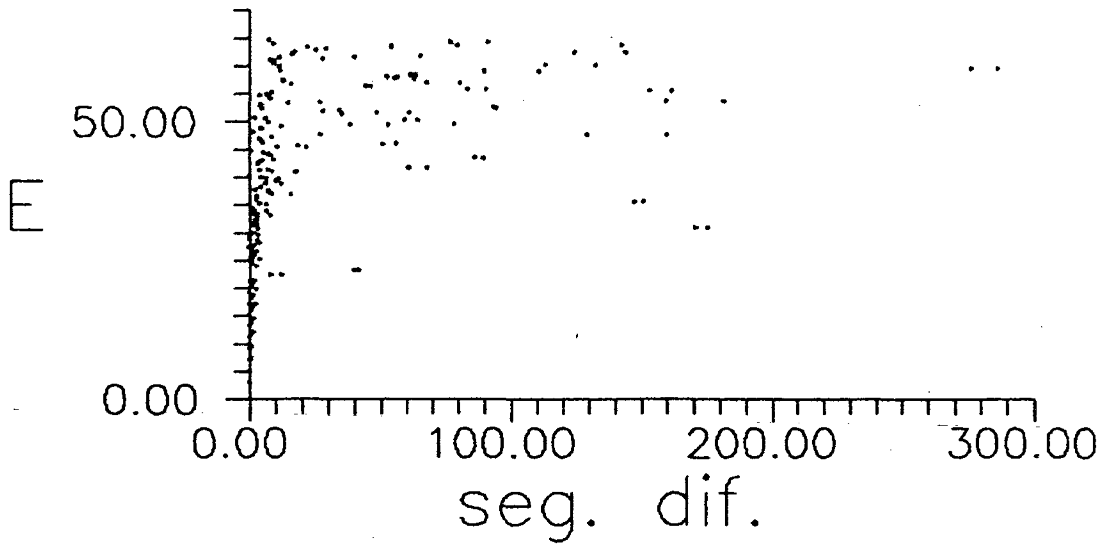


Figura 13. Gráfico da energia em função das segundas diferenças para 180 níveis pertencentes a simetria B_1 ($n_{max} = 68$, b=0.05 e δ b=0.00125).

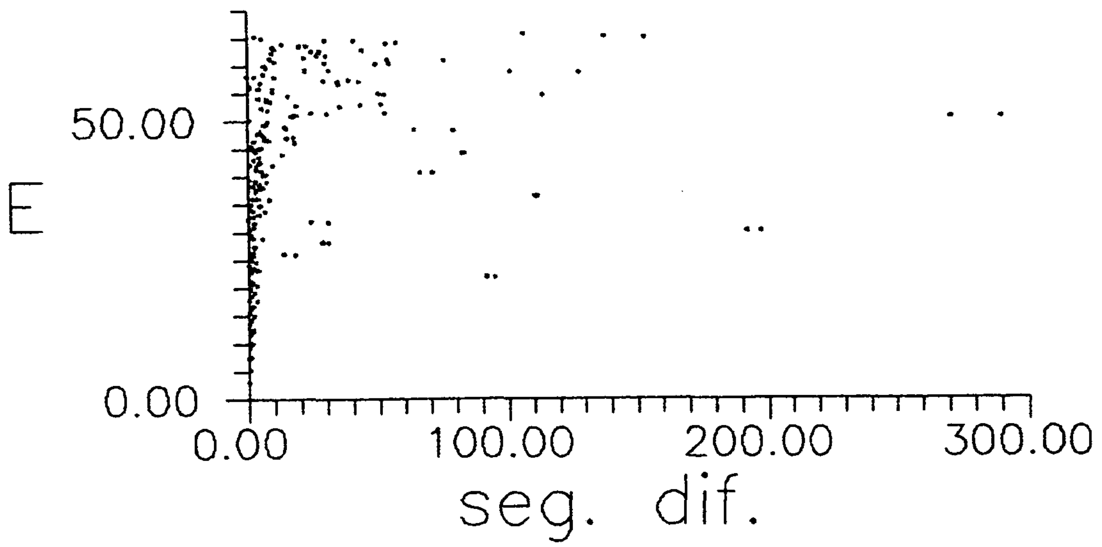


Figura 14. Gráfico da energia em função das segundas diferenças para 180 níveis pertencentes a simetria B_2 ($n_{max} = 68$, b=0.05 e δ b=0.00125).

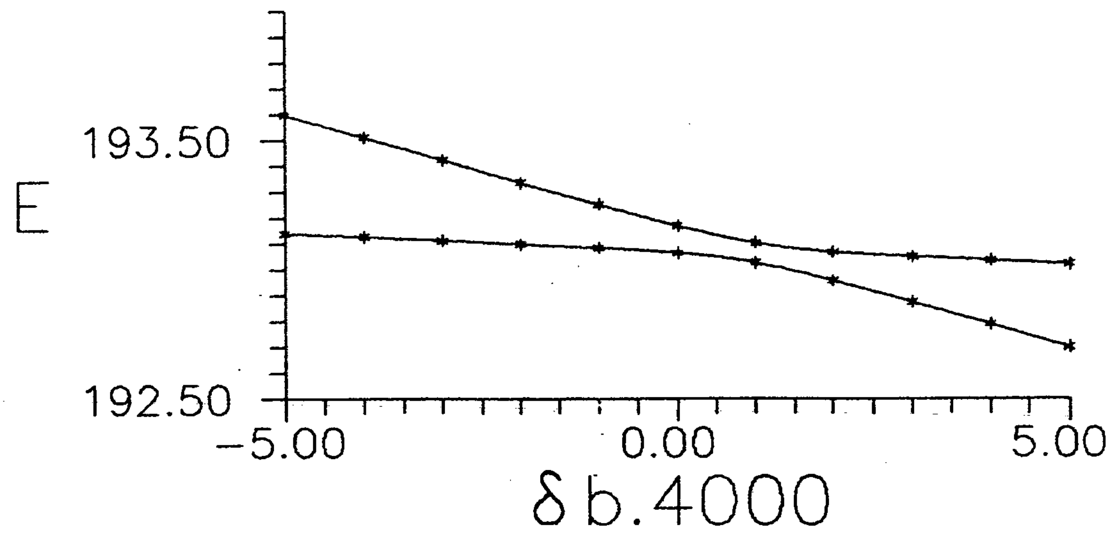


Figura 15. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.05 + \delta b$ para níveis 24 ($\Delta^2 E_{24} = 148.7$) e 25 ($\Delta^2 E_{25} = -146.2$) da simetria A_1.

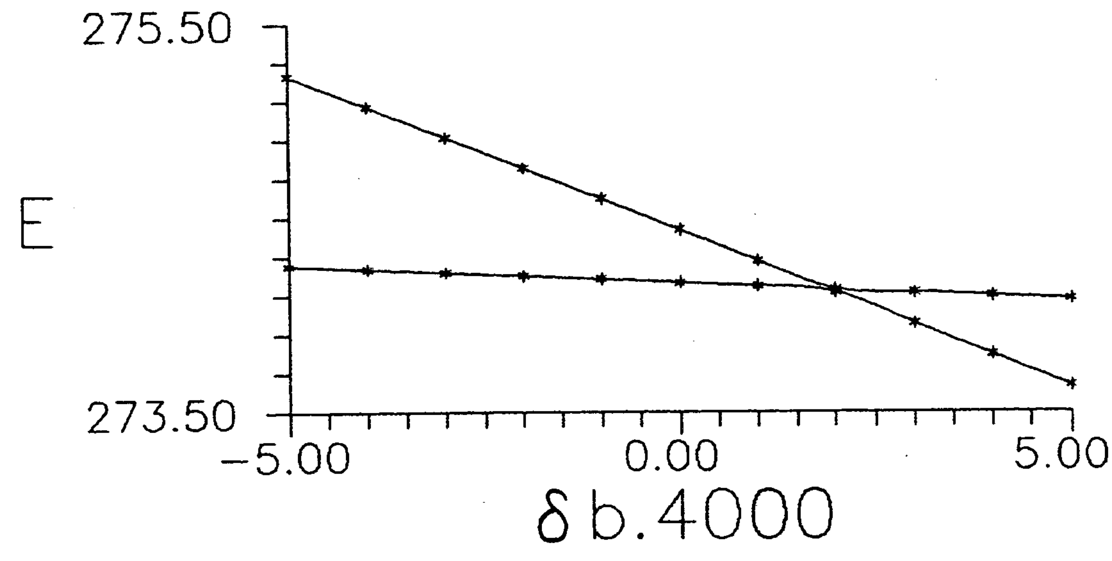
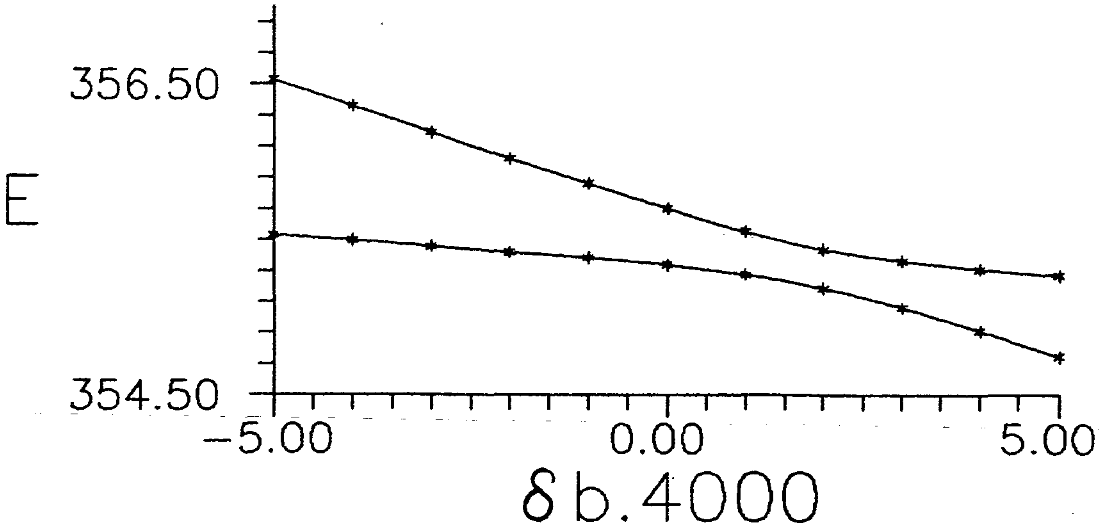


Figura 16. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.05 + \delta b$ para níveis 43 ($\Delta^2 E_{43} = 162.3$) e 44 ($\Delta^2 E_{44} = -158.6$) da simetria A_1.



Fignra 17. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.05 + \delta b$ para níveis 68 ($\Delta^2 E_{68} = 110.8$) e 69 ($\Delta^2 E_{69} = -112.0$) da simetria A_1.

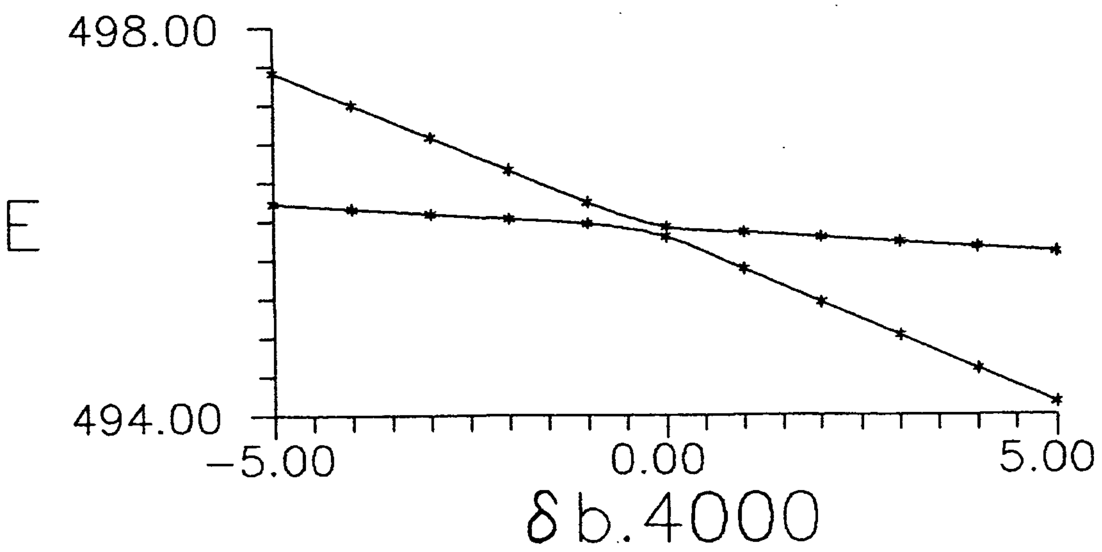


Figura 18. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.05 + \delta b$ para níveis 120 ($\Delta^2 E_{120} = 274.6$) e 121 ($\Delta^2 E_{121} = -269.0$) da simetria A_1.

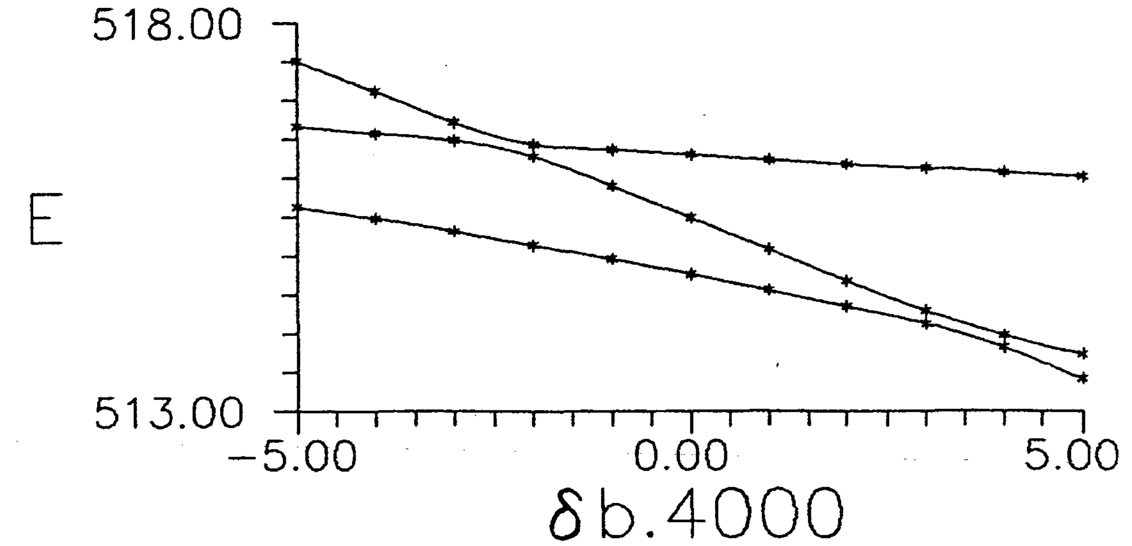


Figura 19. Gráfico da energia ($E_i \times 10$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.05 + \delta b$ para níveis 128 ($\Delta^2 E_{128} = 90.98$), 129 ($\Delta^2 E_{129} = -110.8$) e 130 ($\Delta^2 E_{130} = -180.5$) da simetria A_1.

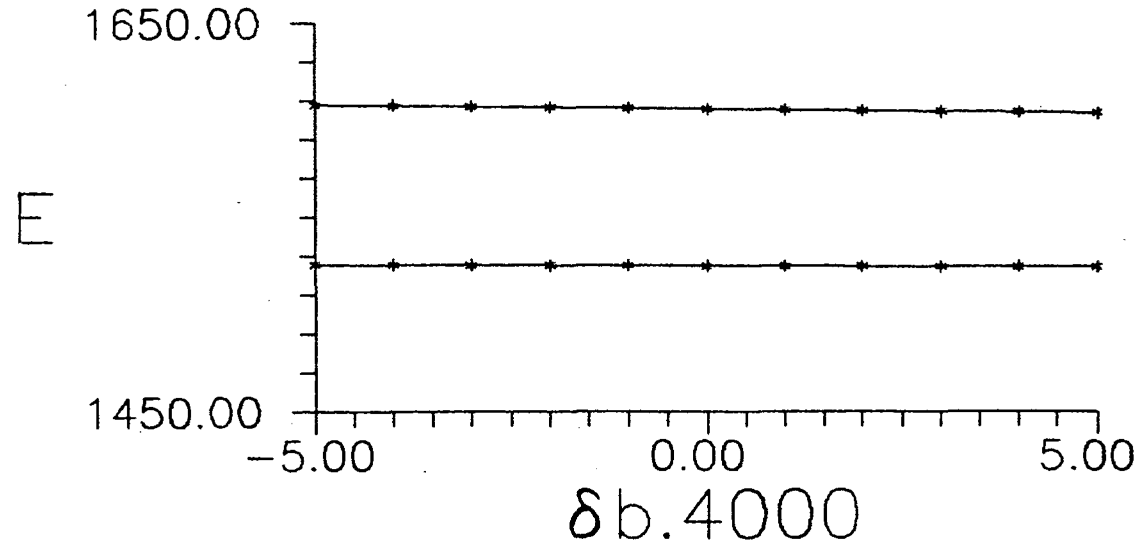


Figura 20. Gráfico da energia ($E_i \times 100$) em função do parâmetro de perturbação $b = 0.05 + \delta b$ para níveis 17 ($\Delta^2 E_{17} = 0.208$) e 18 ($\Delta^2 E_{18} = 0.959$) da simetria A_1.

4. Conclusão.

4.1 Principais conclusões.

Nos dois sistemas quânticos não separáveis estudados no capítulo 3 (hamiltoniano de Henon-Heiles e oscilador harmônico bidimensional com perturbação x^2y^2) observa-se uma transição do comportamento quântico regular (caracterizado por autovalores com pouca sensibilidade a pequenas mudanças na perturbação) para o comportamento irregular ou caótico (caracterizado por autovalores muito sensíveis) como foi previsto por Percival [3] em 1973. Também pôde-se constatar que o intervalo de energia da transição do comportamento quântico regular para o caótico está muito próximo do intervalo de transição do sistema clássico correspondente.

No hamiltoniano de Henon-Heiles se investigou detalhadamente a influência do tamanho da base na sensibilidade dos autovalores. Desprezando os efeitos de tunelamento foi obtido o intervalo de dimensões onde deve-se estudar a sensibilidade dos níveis de energia. Neste intervalo os resultados (autovalores e sensibilidade dos mesmos) se mantém praticamente constantes. Para o hamiltoniano sugerido por Pullen e Edmonds o estudo da sensibilidade foi feito utilizando autovalores com o dobro da precisão usada pelos mesmos em seu artigo [10].

Os gráficos da energia em função do parâmetro de perturbação mostram que as maiores segundas diferenças correspondem a cruzamentos evitados entre os níveis de mesma simetria. Neste trabalho foi fundamental a utilização das simetrias do operador hamiltoniano, que permitiu diagonalizar separadamente os estados simetricos e, assim, obter separadamente os níveis de anergia com simetrias diferentes. Se os estados simétricos não tivessem sido obtidos não haveria certeza se os pontos nos gráficos dos autovalores em função do parâmetro de perturbação pertencem a um ou a outro nível (para os diferentes valores do parâmetro de perturbação) a não ser fazendo várias diagonalizações em intervalos muito pequenos desse parâmetro.

4.2 Principais contribuições.

Um dos objetivos desta dissertação foi o estudo das simetrias de sistemas quânticos, especialmente hamiltonianos não separáveis. O capítulo 3 forneceu uma fundamentação teórica sobre simetrias desses hamiltoniano quânticos a partir da invariância da equação de Schrödinger a operadores de transformação que levou naturalmente ao estudo das representações irredutíveis, um dos objetos de estudo da teoria de grupos. O modo como esse conteúdo se desenvolveu foi bastante original, isto é, bem diferente da seqüência utilizada em outras referências. Este capítulo constitui, então, uma nova introdução ao estudo sobre teoria de grupos, e, mais detalhadamente, ao estudo das simetrias de sistemas quânticos.

O capítulo 3 e apêndices A a D forneceram detalhadamente um método para obter os níveis de energia de sistemas bidimensionais ligados. Esse método, bastante utilizado atualmente, pode ser facilmente aplicado à grande variedade de sistemas ligados mesmo com um número maior de dimensões .

Resumindo, este trabalho contribui bastante para a introdução em duas áreas de pesquisa básica e atual da física quântica, respectivamente, a teoria de grupos e a teoria dos sistemas quânticos ligados.

4.3. Prosseguimento do trabalho.

Um prosseguimento natural desta dissertação é o estudo da quebra de simetrias num sistema físico real não separável: o átomo de hidrogênio em um campo magnético uniforme. Estudos teóricos desta natureza ainda não foram publicados em nenhum local.

Neste trabalho como em outros que tratam de caos quântico, as simetrias tem sido indispensáveis não só para facilitar a obtenção do espectro de energias mas também na própria conceituação de caos. Neste trabalho, por exemplo, a utilização dos estados simétricos foi importante para a análise dos gráficos da energia em função do parâmetro de perturbação. No entanto, o único resultado analítico nesta direção parece ser o teorema de von Neumann e Wigner (1929), Teller (1937) e Arnol'd (1978) que proíbe o cruzamento dos níveis de mesma simetria. Assim, são necessários estudos que expliquem detalhadamente as relações entre as simetrias do sistema e o seu comportamento regular ou caótico.

Apêndice A

Programas para obter níveis de energia do hamiltoniano de Henon-Heiles

Na parte principal deste programa são definidas as dimensões da matriz hamiltoniana G(ID,NC1), onde ID é a dimensão e NC1 é o número de codiagonais mais 1 utilizado no armazenamento por bandas. Estes parâmetros estão definidos para cada $JMX = k_{max} = n_{max}+1$, onde n_{max} é o n máximo (ver equação (3.3)) escolhido no truncamento da matriz. Na subrotina ELEM são calculados os elementos de matriz dos estados de simetria A_1 e A_2 obtidos no capítulo 3 (seções 3.1.1 e 3.1.2). Posteriormente, a matriz hamiltoniana gerada é diagonalizada através da rotina EIGBS (neste programa denominada DGBAND) do IMSLIB (ver apêndice D) que fornece, então , o espectro de energias.

```
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION G(0280,031),GVL(0050)
      DIMENSION BN(0280),BL(0280),WR(7000),GVT(001,001)
C     DO 75 IL = 1,9
C     XL = DFLOAT(IL-5)*2.D-3
C     AL=0.1118D0 + XL
C     XL = DFLOAT(IL-2)/1.D3
C     AL=0.1118D0 + XL*1.1D0
      AL = 0.1118D0
      JMX =56
      IJOB = -1
      ID= 0280
      ND = 0280
      NVL = 050
      NVT = 1
C     NC= JMX/2 + 2
      NC = 30
      NC1 = 31
      MN = 0
      K = 0
      DO 15 J = 1 , JMX
      DJ = DFLOAT(J)
      M = MN + 1
      MN = M + J -1
      DO 15 I = M ,MN
      DI = DFLOAT(I)
      DM = DFLOAT(M)
      EN = DJ -1.D0
      EL = -EN +2.D0*(DI-DM)
      LL = EL
```

```
      IF(MOD(LL,3).NE.0) GOTO 15
C     IF(LL.LE.0) GOTO 15
      IF(LL.LT.0) GOTO 15
      K = K + 1
      BN(K) = EN
      BL(K) = EL
   15 CONTINUE
      IDIM = K
      WRITE(3,10) JMX,IDIM,AL
   10 FORMAT(2(4X,I5),F9.6)
      CALL ELEM(IDIM,G,BN,BL,AL,NC1)
      WRITE(3,30)
   30 FORMAT(' COMECA A DIAGONALIZACAO ')
      CALL DGBAND(G,ID,ND,IJOB,NC,NVL,GVL,GVT,NVT,WR,IERR)
      IR = IERR
      KM = 50
      DO 60 K = 1 , KM
C     WRITE(6,45) K,GVL(K),GVL(K+KM),GVL(K+2*KM),GVL(K+3*KM)
C     WRITE(6,45) K,GVL(K),GVL(K+KM)
C  45 FORMAT(I4,2(2X,F19.14))
      WRITE(6,45) K,GVL(K)
   45 FORMAT(I4,2X,F19.14)
   60 CONTINUE
      WRITE(6,65)
   65 FORMAT(' AL IERR DIM. NIVEL MAX NC')
      WRITE(6,70) AL,IR,IDIM,JMX,NC
   70 FORMAT(F7.4,2X,I4,2X,I4,4X,I3,3X,I4)
   75 CONTINUE
      STOP
      END
      SUBROUTINE ELEM(IDIM,H,BN,BL,FL,NC1)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION H(IDIM,NC1),BN(IDIM),BL(IDIM)
      DO 40 K = 1,IDIM
      DO 40 J = 1 , NC1
      AL = FL
      W = 1.D0
      H(K,J) = 0.D0
      IL = K
      I = K - NC1 +J
      IF(I.LE.0) GOTO 40
      CL = BL(IL)
      CN = BN(IL)
      IF(BL(I)) 2,1,2
```

```
 1      IF(CL) 3,4,3
 2      IF(CL) 4,3,4
 3      AL = FL*DSQRT(2.D0)
        W = 0.D0
 4      IF(J.NE.NC1) GOTO 5
        H(K,NC1)= W*(CN+1.D0)
 5      IF(CL.EQ.0.D0) GOTO 10
        IF(BL(I).EQ.0.D0) GOTO 10
        IF(BN(I).NE.CN) GOTO 10
        IF(BL(I).NE.(-CL)) GOTO 10
        ML = CL
C       SIMETR. A2
C       IF(MOD(ML,2).NE.0) H(K,J) = H(K,J) + (CN + 1.D0)
C       IF(MOD(ML,2).EQ.0) H(K,J) = H(K,J) - (CN + 1.D0)
C       SIMETR. A1
        IF(MOD(ML,2).NE.0) H(K,J) = H(K,J) - (CN + 1.D0)
        IF(MOD(ML,2).EQ.0) H(K,J) = H(K,J) + (CN + 1.D0)
 10     IF(BL(I).NE.(CL+3.D0)) GOTO 15
        IF(BN(I).EQ.(CN+3.D0)) H(K,J)=+AL/6.D0*((CN+CL+2.D0)*(CN+CL+4.D0)
   1                                  *( CN+CL+6.D0)/8.D0)**.5D0
        IF(BN(I).EQ.(CN+1.D0)) H(K,J)= -AL/2.D0*((CN-CL )*(CN+CL+2.D0 )
   1                                  *( CN+CL+4.D0)/8.D0)**.5D0
        IF(BN(I).EQ.(CN-1.D0)) H(K,J)= +AL/2.D0*((CN-CL-2.D0)*(CN-CL )
   1                                  *( CN+CL+2.D0)/8.D0)**.5D0 0
        IF(BN(I).EQ.(CN-3.D0)) H(K,J)= -AL/6.D0*((CN-CL-4.D0)*(CN-CL-2.D0
   1                                  ) *( CN-CL )/8.D0)**.5D0
 15     IF(BL(I).NE.(CL-3.D0)) GOTO 20
        IF(BN(I).EQ.(CN+3.D0)) H(K,J) = -AL/6.D0*((CN-CL+2.D0)*(CN-CL+4.D0
        1                                   )* ( CN-CL+6.D0)/8.D0)**.5D0
        IF(BN(I).EQ.(CN+1.D0)) H(K,J)= AL/2.D0*((CN+CL )*(CN-CL+2.D0
        1                                   )* ( CN-CL+4.D0)/8.D0)**.5D0
        IF(BN(I).EQ.(CN-1.D0)) H(K,J)= -AL/2.D0*((CN+CL-2.D0)*(CN+CL
        1                                   )* ( CN-CL+2.D0)/8.D0)**.5D0
        IF(BN(I).EQ.(CN-3.D0)) H(K,J)= AL/6.D0*((CN+CL-4.D0)*(CN+CL-2.D0
        1                                   )* ( CN+CL )/8.D0)**.5D0
 20     AL = FL
        IF(CL.EQ.0.D0) GO TO 40
        IF(BL(I).EQ.0.D0) GOTO 40
        IF(MOD(ML,2).NE.0) AL=-AL
        IF(BL(IL).NE.(-CL+3.D0)) GOTO 25
        IF(BN(IL).EQ.(CN+3.D0)) H(K,J)=+AL/6.D0*((CN-CL+2.D0)*(CN-CL+4.D0
   1                                  )* ( CN-CL+6.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
        IF(BN(IL).EQ.(CN+1.D0)) H(K,J)= -AL/2.D0*((CN+CL )*(CN-CL+2.D0
   1                                  )* ( CN-CL+4.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
```

```
      IF(BN(IL).EQ.(CN-1.D0)) H(K,J)= +AL/2.D0*((CN+CL-2.D0)*(CN+CL
     1                              )* ( CN-CL+2.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN-3.D0)) H(K,J)=-AL/6.D0*((CN+CL-4.D0)*(CN+CL-2.D0
     1                              )* ( CN+CL )/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
   25 IF(BL(IL).NE.(-CL-3.D0)) GOTO 40
      IF(BN(IL).EQ.(CN+3.D0)) H(K,J)=-AL/6.D0*((CN+CL+2.D0)*(CN+CL+4.D0
     1                              ) *( CN+CL+6.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN+1.D0)) H(K,J)= +AL/2.D0*((CN-CL )*(CN+CL+2.D0
     1                         * ) *( CN+CL+4.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN-1.D0)) H(K,J)= -AL/2.D0*((CN-CL-2.D0)*(CN-CL )
     1                              *( CN+CL+2.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN-3.D0)) H(K,J)=+AL/6.D0*((CN-CL-4.D0)*(CN-CL-2.D0
     1                              ) *( CN-CL )/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
   40 CONTINUE
      RETURN
      END
```

Este programa fornece o espectro de energias dos estados de simetria E_1 através da diagonalização da matriz hamiltoniana obtida no capítulo 3 (ver seções 3.1.1 e 3.1.2) para esses mesmos estados. As variáveis utilizadas são análogas as do programa anterior.

```
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION G(0330,044),GVL(01)
      DIMENSION BN(0330),BL(0330),WR(55),GVT(001,001)
C     DO 75 IL = 1,9
C     XL = DFLOAT(IL-5)/2.D3
C     AL = 0.0880 + XL
      AL=0.1118D0
      JMX = 44
      IJOB = -1
      ID= 330
      ND = 330
      NVL = 1
      NVT = 1
C     NC = JMX-1
      NC = 43
      NC1 = 44
C
      MN = 0
      K = 0
      DO 15 J = 1 , JMX
      DJ = DFLOAT(J)
      M = MN + 1
      MN = M + J -1
      DO 15 I = M ,MN
```

```
      DI = DFLOAT(I)
      DM = DFLOAT(M)
      EN = DJ -1.D0
      EL = -EN +2.D0*(DI-DM)
      LL = EL
      IF(MOD(LL,3).EQ.0) GOTO 15
      IF(LL.LT.0) GOTO 15
      K = K + 1
      BN(K) = EN
      BL(K) = EL
C     WRITE(6,10) K,BN(K),BL(K)
C  10 FORMAT(I4,2(3X,F6.2))
  15  CONTINUE
      IDIM = K
      WRITE(3,17) IDIM,AL
  17  FORMAT(' IDIM = ',I4,' AL = ',F7.5)
      CALL ELEM(IDIM,G,BN,BL,AL,NC1)
      KM = 1
      WRITE(3,30)
  30  FORMAT(' COMECA DIAGONALIZACAO ')
      CALL DGBAND(G,ID,ND,IJOB,NC,NVL,GVL,GVT,NVT,WR,IERR)
      IR = IERR
      DO 60 K = 1 , KM
      L =K+KM
      M =L+KM
      N =M+KM
      WRITE(6,46) K,GVL(K)
  46  FORMAT(I4,2X,F19.14)
C     WRITE(6,55) K,GVL(K),GVL(L),GVL(M),GVL(N)
C     WRITE(6,55) K,GVL(K),GVL(L),GVL(M)
C  55 FORMAT(I4,4(2X,F19.14))
  60  CONTINUE
      WRITE(6,65)
  65  FORMAT(' AL IERR DIM. NIVEL MAX ')
      WRITE(6,70) AL,IR,IDIM,JMX
  70  FORMAT(F7.4,2X,I4,2X,I3,4X,I3)
  75  CONTINUE
      STOP
      END
      SUBROUTINE ELEM(IDIM,H,BN,BL,FL,NC1)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION H(IDIM,NC1),BN(IDIM),BL(IDIM)
      DO 50 K = 1,IDIM
      DO 50 J = 1 , NC1
```

```
      H(K,J) = 0.D0
      IL= K
      I = K - NC1 +J
      IF(I.LE.0) GOTO 50
      CL = BL(I)
      CN = BN(I)
      DL = BL(IL)
      ML = CL
      NL = BL(IL)
      MNL = NL + ML
      H(K,NC1)=BN(IL)+1.D0
      IF(BN(IL).NE.CN) GOTO 10
      IF(BL(IL).NE.(-CL)) GOTO 10
      IF(MOD(ML,2).NE.0) H(K,J) = H(K,J) - (CN+1.D0)
      IF(MOD(ML,2).EQ.0) H(K,J) = H(K,J) + (CN+1.D0)
10    AL = FL
      IF(BL(IL).NE.(CL+3.D0)) GOTO 15
      IF(BN(IL).EQ.(CN+3.D0)) H(K,J)=+AL/6.D0*((CN+CL+2.D0)*(CN+CL+4.D0
     1                              ) *( CN+CL+6.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN+1.D0)) H(K,J)= -AL/2.D0*((CN-CL )*(CN+CL+2.D0
     1                              ) *( CN+CL+4.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN-1.D0)) H(K,J)= +AL/2.D0*((CN-CL-2.D0)*(CN-CL )
     1                              *( CN+CL+2.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN-3.D0)) H(K,J)=-AL/6.D0*((CN-CL-4.D0)*(CN-CL-2.D0
     1                              ) *( CN-CL )/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
15    IF(BL(IL).NE.(CL-3.D0)) GOTO 20
      IF(BN(IL).EQ.(CN+3.D0)) H(K,J)=-AL/6.D0*((CN-CL+2.D0)*(CN-CL+4.D0
     1                              )* ( CN-CL+6.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN+1.D0)) H(K,J)=AL/2.D0*((CN+CL )*(CN-CL+2.D0
     1                              )* ( CN-CL+4.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN-1.D0)) H(K,J)= -AL/2.D0*((CN+CL-2.D0)*(CN+CL
     1                              )* ( CN-CL+2.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN-3.D0)) H(K,J)=AL/6.D0*((CN+CL-4.D0)*(CN+CL-2.D0
     1                              )* ( CN+CL )/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
20    AL =-FL
      IF(MOD(ML,2).NE.0) AL=-AL
      IF(BL(IL).NE.(-CL+3.D0)) GOTO 25
      IF(BN(IL).EQ.(CN+3.D0)) H(K,J)=-AL/6.D0*((CN-CL+2.D0)*(CN-CL+4.D0
     1                              )* ( CN-CL+6.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN+1.D0)) H(K,J)= AL/2.D0*((CN+CL )*(CN-CL+2.D0
     1                              )* ( CN-CL+4.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN-1.D0)) H(K,J)= -AL/2.D0*((CN+CL-2.D0)*(CN+CL
     1                              )* ( CN-CL+2.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
      IF(BN(IL).EQ.(CN-3.D0)) H(K,J)=AL/6.D0*((CN+CL-4.D0)*(CN+CL-2.D0
```

```
 1                                  )* ( CN+CL )/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
25   IF(BL(IL).NE.(-CL-3.D0)) GOTO 50
     IF(BN(IL).EQ.(CN+3.D0)) H(K,J)=+AL/6.D0*((CN+CL+2.D0)*(CN+CL+4.D0
 1                                  ) *( CN+CL+6.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
     IF(BN(IL).EQ.(CN+1.D0)) H(K,J)= -AL/2.D0*((CN-CL )*(CN+CL+2.D0
 1                                  ) *( CN+CL+4.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
     IF(BN(IL).EQ.(CN-1.D0)) H(K,J)= +AL/2.D0*((CN-CL-2.D0)*(CN-CL )
 1                                  *( CN+CL+2.D0)/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
     IF(BN(IL).EQ.(CN-3.D0)) H(K,J)=-AL/6.D0*((CN-CL-4.D0)*(CN-CL-2.D0
 1                                  ) *( CN-CL )/8.D0)**.5D0 +H(K,J)
50   CONTINUE
     RETURN
     END
```

Apêndice B

Programa para obter espectro com simetria A_1, A_2, B_1 e B_2 do potencial de Pullen e Edmonds.

Este programa fornece separadamente o espectro de energia dos estados de simetria A_1, A_2, B_1 e B_2 obtidos na seção 3.2.1. G(ID,NC1) é a matriz hamiltonina cujos elementos de matriz foram obtidos na seção 3.2.2 são calculados na subroutina ELEM. ID é a dimensão da matriz e NC1 o número de codiagonais mais 1 usado no modo de armazenamento por bandas. Estes parâmetros são definidos para cada $JMAX = n_{max}$, onde n_{max} é o n máximo escolhido no truncamento da matriz.

```
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION G(0595,035),GVL(180)
      DIMENSION BI(595),BJ(595),WR(13000),GVT(1,1)
      AL=0.05D0
      W = 1.D0
      HC = 1.D0
      JMAX= 68
      ND = 595
      ID = 595
      IJOB = -1
      NVL = 180
      NVT = 1
C     NC = JMAX/2 + 1
      NC = 34
      NC1= 35
      L = 0
      JM1 = JMAX + 1
      JN1 = JMAX - 1
      DO 15 I1 = 1,JN1,2
C     DO 15 I1 = 1,JM1,2
      I = I1 - 1
C     I = I1
      I2 = I1 + 2
      DO 15 J1 = I2,JM1,2
      J = J1 - 1
C     J = J1
      L = L +1
      BI(L) = DFLOAT(I)
      BJ(L) = DFLOAT(J)
C     WRITE(6,10) L,BI(L),BJ(L)
C  10 FORMAT(I5,2(3X,F9.4))
   15 CONTINUE
```

```
      IDIM = L
      CALL ELEM(IDIM,G,BI,BJ,HC,W,AL,NC1)
      WRITE(3,30) IDIM,AL
   30 FORMAT(' COMECA DIAGONALIZACAO ,IDIM = ',I5,' AL= ',F10.6)
      CALL DGBAND(G,ID,ND,IJOB,NC,NVL,GVL,GVT,NVT,WR,IERR)
      IR = IERR
      KM = 45
      DO 60 K = 1 , KM
      L =K+KM
      M =L+KM
      N =M+KM
C     WRITE(6,45) K,GVL(K)
C  45 FORMAT(I4,2X,F19.14)
      WRITE(6,55) K,GVL(K),GVL(L),GVL(M),GVL(N)
   55 FORMAT(I4,4(2X,F19.14))
   60 CONTINUE
      WRITE(6,65)
   65 FORMAT(' AL IERR DIM. NIVEL MAX NC')
      WRITE(6,70) AL,IR,ID,JMAX,NC
   70 FORMAT(F7.5,1X,I4,2X,I4,4X,I3,5X,I3)
   75 CONTINUE
      STOP
      END
      SUBROUTINE ELEM(IDIM,H,BI,BJ,HC,W,AL,NC1)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION H(IDIM,NC1),BI(IDIM),BJ(IDIM)
      EC = AL*(HC/(2.D0*W))**2.0D0
      DO 40 K = 1,IDIM
      DO 40 J =1,NC1
      FC = EC
      WL = W
      H(K,J) = 0.D0
      IL = K
      I = K + J - NC1
      IF(I.LE.0) GOTO 40
      B1 = BI(I)
      B2 = BJ(I)
      IF(B1-B2) 2,1,2
    1 IF(BI(IL)-BJ(IL)) 3,4,3
    2 IF(BI(IL)-BJ(IL)) 4,3,4
    3 FC = FC*DSQRT(2.D0)
      WL= W*DSQRT(2.D0)
    4 H(K,NC1) = (B1 + B2 + 1.D0)*HC*WL
      IF(B1.EQ.B2) GOTO 8
```

```
      IF(BI(IL).EQ.BJ(IL)) GOTO 8
      IF(B1.NE.BJ(IL)) GOTO 8
      IF(B2.NE.BI(IL)) GOTO 8
      H(K,J) = H(K,J) - (B1 + B2 + 1.D0)*HC*W
8     IF(BJ(IL).NE.B2) GOTO 5
      IF(BI(IL).EQ.B1) H(K,J)=H(K,J) +FC*(2.D0*B1+1.D0)
     1                               *(2.D0*B2+1.D0)
      IF(BI(IL).EQ.(B1-2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT(B1*(B1-1.D0))
     1                               *(2.D0*B2+1.D0)
      IF(BI(IL).EQ.(B1+2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT((B1+1.D0)
     1                               *(B1+2.D0))*(2.D0*B2+1.D0)
5     IF(BJ(IL).NE.(B2-2.D0)) GOTO 10
      IF(BI(IL).EQ.B1) H(K,J)=H(K,J) +FC*(2.D0*B1+1.D0)
     1                               *DSQRT(B2*(B2-1.D0))
      IF(BI(IL).EQ.(B1-2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT(B1*(B1-1.D0)
     1                               *B2*(B2-1.D0))
      IF(BI(IL).EQ.(B1+2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT((B1+1.D0)
     1                               *(B1+2.D0)*B2*(B2-1.D0))
10    IF(BJ(IL).NE.(B2+2.D0)) GOTO 20
      IF(BI(IL).EQ.B1) H(K,J)=H(K,J) +FC*(2.D0*B1+1.D0)
     1                               *DSQRT((B2+2.D0)*(B2+1.D0))
      IF(BI(IL).EQ.(B1-2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT(B1*(B1-1.D0)
     1                               *(B2+2.D0)*(B2+1.D0))
      IF(BI(IL).EQ.(B1+2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT((B1+1.D0)
     1                               *(B1+2.D0)*(B2+2.D0)*(B2+1.D0))
20    FC = - EC
      IF(B1.EQ.B2) GOTO 40
      IF(BI(IL).EQ.BJ(IL)) GOTO 40
      IF(BJ(IL).NE.B1) GOTO 25
      IF(BI(IL).EQ.B2) H(K,J)=H(K,J) +FC*(2.D0*B2+1.D0)
     1                               *(2.D0*B1+1.D0)
      IF(BI(IL).EQ.(B2-2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT(B2*(B2-1.D0))
     1                               *(2.D0*B1+1.D0)
      IF(BI(IL).EQ.(B2+2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT((B2+1.D0)
     1                               *(B2+2.D0))*(2.D0*B1+1.D0)
25    IF(BJ(IL).NE.(B1-2.D0)) GOTO 30
      IF(BI(IL).EQ.B2) H(K,J)=H(K,J) +FC*(2.D0*B2+1.D0)
     1                               *DSQRT(B1*(B1-1.D0))
      IF(BI(IL).EQ.(B2-2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT(B2*(B2-1.D0)
     1                               *B1*(B1-1.D0))
      IF(BI(IL).EQ.(B2+2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT((B2+1.D0)
     1                               *(B2+2.D0)*B1*(B1-1.D0))
30    IF(BJ(IL).NE.(B1+2.D0)) GOTO 40
      IF(BI(IL).EQ.B2) H(K,J)=H(K,J) +FC*(2.D0*B2+1.D0)
```

```
     1                                  *DSQRT((B1+2.D0)*(B1+1.D0))
      IF(BI(IL).EQ.(B2-2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT(B2*(B2-1.D0)
     1                                  *(B1+2.D0)*(B1+1.D0))
      IF(BI(IL).EQ.(B2+2.D0)) H(K,J)=H(K,J)+FC*DSQRT((B2+1.D0)
     1                                  *(B2+2.D0)*(B1+2.D0)*(B1+1.D0))
40    CONTINUE
      RETURN
      END
```

Apêndice C

Este apêndice apresenta os diferentes modos de armazenamento de matrizes: simétrico, por bandas e simétrico por bandas que, quando devidamente utilizados, permitem trabalhar com matrizes de ordem elevada com menor quantidade de tempo e memória do computador.

MATRIX/VECTOR STORAGE MODES

MANY OF THE IMSL LIBRARY ROUTINES DEAL WITH MATRICES AND VECTORS. USERS SHOULD BE FAMILIAR WITH THE MANNER IN WHICH THESE ENTITIES ARE DECLARED AND MANIPULATED IN FORTRAN. AN ENVIRONMENT SPECIFIC FORTRAN REFERENCE MANUAL PROVIDES THE NECESSARY INFORMATION. IT IS THE PURPOSE OF THIS SECTION TO GIVE A BRIEF INTRODUCTION TO THIS TOPIC AND TO DEFINE OTHER STORAGE MODES USED BY IMSL SUB- ROUTINES.

FULL STORAGE MODE

THE TERM VECTOR REFERS TO A FORTRAN ARRAY WITH ONE DIMENSION AND MATRIX REFERS TO AN ARRAY WITH TWO DIMENSIONS. FORTRAN ARRAYS OCCUPY A CONSECUTIVE SEQUENCE OF MEMORY LOCATIONS. A VECTOR V OF LENGTH 10 OCCUPIES TEN MEMORY LOCATIONS, REFERRED TO AS V(1),V(2),...,V(10). V MAY BE DECLARED IN A FORTRAN PROGRAM IN A DIMENSION STATEMENT AS FOLLOWS.

DIMENSION V(10)

MATRICES ARE DECLARED IN A SIMILAR MANNER, BUT TWO DIMENSION BOUNDS ARE USED. FOR EXAMPLE, A 10 BY 20 MATRIX NAMED A IS DECLARED AS FOLLOWS.

DIMENSION A(10,20)

THE NUMBER 10 IS THE FIRST DIMENSION BOUND AND 20 IS THE SECOND. THIS DECLARES A SEQUENCE OF 200 CONSECUTIVE MEMORY LOCATIONS THAT ARE REFERRED TO AS A(1,1),A(2,1),...,A(10,1),A(1,2),A(2,2),..., A(10,2),..., A(1,20), A(2,20),...,A(10,20) (I.E., MATRICES ARE STORED BY COLUMNS.) IMSL DOCUMENTS REFER TO THIS AS * FULL STORAGE MODE *.

A 5 BY 5 SUBMATRIX MAY BE STORED IN THE 25 LOCATIONS ((A(I,J), I=1,5),J=1,5). IT IS POSSIBLE TO PASS THIS 5 BY 5 SUBMATRIX TO AN IMSL ROUTINE EVEN THOUGH A HAS BEEN DECLARED TO BE 10 BY 20. THIS IS WHERE ADJUSTABLE DIMENSIONING IS USED.

SUPPOSE THAT THIS 5 BY 5 SUBMATRIX IS INITIALIZED, N IS SET TO 5 AND IA IS SET TO 10 (THE ROW DIMENSION OF A). THEN THE FOLLOW- ING CALL

STATEMENT WOULD CAUSE A TO BE PASSED TO SUBROUTINE SUBR CORRECTLY.

```
      DIMENSION A(10,20)
      IA=10
      N=5
                  (INITIALIZE 5 BY 5 SUBMATRIX OF A)
      CALL SUBR(A,IA,N)
```

THE FOLLOWING STATEMENTS WOULD APPEAR IN SUBR,

```
      SUBROUTINE SUBR(A,IA,N)
      DIMENSION A(IA,N)
         .
         .
         .
      END
```

IT IS IN THIS MANNER THAT MANY IMSL SUBROUTINES UTILIZE THE FORTRAN ADJUSTABLE ARRAY FEATURE. THE DOCUMENTATION FOR SUCH SUBROUTINES REFER TO A AS A MATRIX, N AS THE ORDER OF A (OR THE NUMBER OF ROWS IN A), AND IA AS THE ROW DIMENSION OF MATRIX A EXACTLY AS SPECIFIED IN THE DIMENSION STATEMENT IN THE CALLING PROGRAM. IF THE MATRIX IS NOT SQUARE THEN ANOTHER ARGUMENT, M, IS REQUIRED TO SPECIFY THE NUMBER OF COLUMNS IN A. THE SECOND DIMENSION BOUND, 20 IN THIS EXAMPLE, IS NOT REQUIRED BY THE SUBROUTINE AND OFTEN THE DIMENSION STATEMENT FOR A IN THE IMSL SUBROUTINE USES 1 (I.E., DIMENSION A(IA,1)). IN THIS CASE, IT IS UNDERSTOOD THAT THE SUBROUTINE MAY REFERENCE AS MANY COLUMNS AS SPECIFIED BY THE DOCUMENT. THE DIMENSION STATEMENT FOR A IN THE CALLING PROGRAM MUST DECLARE A ACCORDINGLY.

OTHER STORAGE MODES ARE USED BY SOME IMSL LIBRARY SUBROUTINES IN ORDER TO CONSERVE COMPUTER MEMORY. THESE ARE DESCRIBED IN THE FOLLOWING SECTIONS.

SYMMETRIC STORAGE MODE

A SYMMETRIC MATRIX HAS THE PROPERTY THAT A(I,J)=A(J,I) AND SYMMETRIC STORAGE MODE REPRESENTS SUCH MATRICES AS VECTORS. ONLY THE ELEMENTS ON AND BELOW THE MAIN DIAGONAL ARE STORED (BY ROWS).

THE ORDER AND OCCURRENCE OF THESE ELEMENTS IN MEMORY ARE AS FOLLOWS (ASSUMING A IS A SYMMETRIC MATRIX AND B IS A VECTOR).

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & & \\ A_{21} & A_{22} & \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{21} \\ A_{22} \\ A_{31} \\ A_{32} \\ A_{33} \end{pmatrix} = B$$

AN N BY N MATRIX IN SYMMETRIC STORAGE MODE IS REDUCED TO A VECTOR OF LENGTH N(N+1)/2 WHERE THE ELEMENT IJ CAN BE FOUND AS THE ELEMENT K OF THE VECTOR B, WHERE K=(I(I-1)/2)+J FOR I.GE.J. FOR I.LT.J, THE ELEMENT IJ IS IDENTICAL TO THE ELEMENT JI. STORING A MATRIX IN THIS MANNER EFFECTS A SAVINGS OF N(N-1)/2 MEMORY LOCATIONS.

BAND AND BAND SYMMETRIC STORAGE MODE

AN N BY N BAND MATRIX WITH K LOWER CODIAGONALS AND J UPPER CODIAGONALS STORED IN BAND STORAGE MODE IS REDUCED TO A MATRIX OF DIMENSION N BY (K+J+1). THE MATRIX IS STORED ROWWISE SO THAT THE ZERO ELEMENTS ARE COMPRESSED OUT OF THE MATRIX AND THE MAIN DIAGONAL ELEMENTS FALL IN COLUMN K+1. FOR EXAMPLE, THE 5 BY 5 BAND MATRIX A, WITH 1 LOWER AND 2 UPPER CODIAGONALS, WOULD BE STORED IN BAND STORAGE MODE IN MATRIX B AS SHOWN BELOW.

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} & 0 \\ 0 & A_{32} & A_{33} & A_{34} & A_{35} \\ 0 & 0 & A_{43} & A_{44} & A_{45} \\ 0 & 0 & 0 & A_{54} & A_{55} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{32} & A_{33} & A_{34} & A_{35} \\ A_{43} & A_{44} & A_{45} & 0 \\ A_{54} & A_{55} & 0 & 0 \end{pmatrix} = B$$

AN N BY N SYMMETRIC BAND MATRIX WITH K LOWER AND K UPPER CODIAGONALS STORED IN BAND SYMMETRIC STORAGE MODE IS REDUCED TO A MATRIX OF DIMENSION N BY (K+1). ONLY THE ELEMENTS ON THE MAIN DIAGONAL AND THE K SUB-DIAGONALS ARE STORED. THE MATRIX IS STORED ROWWISE SO THAT THE MAIN DIAGONAL ELEMENTS FALL IN COLUMN K+1. FOR EXAMPLE, THE 5 BY 5 BAND SYMMETRIC MATRIX A, WITH 1 LOWER AND UPPER CODIAGONALS WOULD BE STORED IN SYMMETRIC BAND STORAGE MODE IN MATRIX B AS SHOWN BELOW.

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & 0 & 0 \\ 0 & A_{32} & A_{33} & A_{34} & 0 \\ 0 & 0 & A_{43} & A_{44} & A_{45} \\ 0 & 0 & 0 & A_{54} & A_{55} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & A_{11} \\ A_{21} & A_{22} \\ A_{32} & A_{33} \\ A_{43} & A_{44} \\ A_{54} & A_{55} \end{pmatrix} = B$$

Apêndice D

Este apêndice tem a finalidade de mostrar as caracteristicas da rotina de diagonalização EIGBS utilizada nos programas em FORTRAN dos apêndices A e B. Esta rotina foi escolhida principalmente devido a possibilidade de utilização do modo de armazenamento simétrico por bandas da matriz hamiltoniana.

IMSL ROUTINE NAME - EIGBS

```
COMPUTER       - IBM/DOUBLE

LATEST REVISION          - JUNE 1, 1980

PURPOSE        - FIND SOME EIGENVALUES AND (OPTIONALLY)
                 EIGENVECTORS OF A REAL SYMMETRIC
                 BAND MATRIX

USAGE          - CALL EIGBS (A,N,IA,IJOB,NC,M,D,Z,IZ,WORK,IER)

ARGUMENTS
        A      - INPUT MATRIX WHOSE EIGENVALUES ARE TO
                 BE DETERMINED. A IS ASSUMED TO BE STORED
                 IN BAND SYMMETRIC STORAGE MODE AND THEREFORE
                 HAS DIMENSION N BY (NC+1). A IS DESTROYED
                 BY EIGBS ON OUTPUT IF ABS(IJOB) = 1.
        N      - INPUT ORDER OF THE MATRIX A
        IA     - INPUT ROW DIMENSION OF MATRIX A EXACTLY AS
                 SPECIFIED IN THE DIMENSION STATEMENT IN
                 THE CALLING PROGRAM.
        IJOB   - INPUT OPTION PARAMETER. WHEN
                 IJOB=-1, COMPUTE THE M SMALLEST EIGENVALUES.
                 IJOB=-2, COMPUTE THE M SMALLEST EIGENVALUES
                 AND CORRESPONDING EIGENVECTORS.
                 IJOB=-3, COMPUTE THE M SMALLEST EIGENVALUES
                 AND CORRESPONDING EIGENVECTORS AND THE
                 PERFORMANCE INDEX.
                 IJOB=1, COMPUTE THE M LARGEST EIGENVALUES
                 IJOB=2, COMPUTE THE M LARGEST EIGENVALUES
                 AND CORRESPONDING EIGENVECTORS.
                 IJOB=3, COMPUTE THE M LARGEST EIGENVALUES
                 AND CORRESPONDING EIGENVECTORS AND THE
                 PERFORMANCE INDEX.
                 IF THE PERFORMANCE INDEX IS COMPUTED, IT
```

IS RETURNED IN WORK(1). THE ROUTINES HAVE PERFORMED (WELL, SATISFACTORILY, POORLY) IF WORK(1) IS (LESS THAN 1, BETWEEN 1 AND 100, GREATER THAN 100).

NC - INPUT NUMBER OF UPPER OR LOWER CODIAGONALS OF MATRIX A.

M - INPUT NUMBER OF EIGENVALUES DESIRED

D - OUTPUT VECTOR OF LENGTH AT LEAST M CONTAINING THE M LARGEST OR SMALLEST EIGENVALUES.

Z - OUTPUT MATRIX OF DIMENSION N BY M CONTAINING THE EIGENVECTORS. THE EIGENVECTOR CORRESPONDING TO EIGENVALUE D(I) WILL BE PLACED IN COLUMN I OF Z. IF ABS(IJOB)=1, Z IS NOT USED.

IZ - INPUT ROW DIMENSION OF MATRIX Z EXACTLY AS SPECIFIED IN THE DIMENSION STATEMENT IN THE CALLING PROGRAM.

WORK - WORKSPACE VECTOR WITH DIMENSION=
IF ABS(IJOB)=1, AT LEAST 3*N
IF ABS(IJOB)=2 OR 3, AT LEAST N*(3*NC+6)

IER - ERROR PARAMETER (OUTPUT)
WARNING ERROR (WITH FIX)
IER = 66, INDICATES IJOB IS OUT OF RANGE. IJOB EQUAL TO 1 (OR -1) IS USED.
IER = 67, INDICATES ABS(IJOB) = 2 OR 3 AND IZ IS LESS THAN THE ORDER OF MATRIX A. IJOB EQUAL TO 1 (OR -1) IS USED.
TERMINAL ERROR
IER = 129 IMPLIES THAT SOME EIGENVECTORS WERE NOT CALCULATED ACCEPTABLY. THE COLUMNS OF Z CORRESPONDING TO THOSE EIGENVECTORS ARE SET TO ZERO.

PRECISION/HARDWARE - DOUBLE/H32

REQD. IMSL ROUTINES - EBNDR,EBNDV,EQRT1S,UERTST,UGETIO,VMULQF

NOTATION - INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP

WARRANTY - IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN

APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY, EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.

IMSL ROUTINE NAME - EQRT1S

COMPUTER - IBM/DOUBLE

LATEST REVISION - JUNE 1, 1980

PURPOSE - SMALLEST OR LARGEST M EIGENVALUES OF A SYMMETRIC TRIDIAGONAL MATRIX

USAGE - CALL EQRT1S (D,E2,N,M,ISW,IER)

ARGUMENTS

D - INPUT VECTOR OF LENGTH N CONTAINING THE DIAGONAL ELEMENTS OF THE MATRIX. THE COMPUTED EIGENVALUES REPLACE THE FIRST M COMPONENTS OF THE VECTOR D IN NON-DECREASING SEQUENCE, WHILE THE REMAINING COMPONENTS ARE LOST.

E2 - INPUT VECTOR OF LENGTH N CONTAINING THE SQUARES OF THE OFF-DIAGONAL ELEMENTS OF THE MATRIX. INPUT E2 IS DESTROYED.

N - INPUT SCALAR CONTAINING THE ORDER OF THE MATRIX.

M - INPUT SCALAR CONTAINING THE NUMBER OF SMALLEST EIGENVALUES DESIRED (M IS LESS THAN OR EQUAL TO N).

ISW - INPUT SCALAR MEANING AS FOLLOWS -
ISW=1 MEANS THAT THE MATRIX IS KNOWN TO BE POSITIVE DEFINITE.
ISW=0 MEANS THAT THE MATRIX IS NOT KNOWN TO BE POSITIVE DEFINITE.

IER - ERROR PARAMETER. (OUTPUT)
WARNING ERROR
IER = 33 INDICATES THAT SUCCESSIVE ITERATES TO THE K-TH EIGENVALUE WERE NOT MONOTONE INCREASING. THE VALUE K IS STORED IN E2(1).
TERMINAL ERROR
IER = 130 INDICATES THAT ISW=1 BUT MATRIX

IS NOT POSITIVE DEFINITE

PRECISION/HARDWARE - DOUBLE/H32

REQD. IMSL ROUTINES - UERTST,UGETIO

NOTATION - INFORMATION ON SPECIAL NOTATION AND CONVENTIONS IS AVAILABLE IN THE MANUAL INTRODUCTION OR THROUGH IMSL ROUTINE UHELP

REMARKS AS WRITTEN, THE ROUTINE COMPUTES THE M SMALLEST EIGENVALUES. TO COMPUTE THE M LARGEST EIGENVALUES, REVERSE THE SIGN OF EACH ELEMENT OF D BEFORE AND AFTER CALLING THE ROUTINE. IN THIS CASE, ISW MUST EQUAL ZERO.

WARRANTY - IMSL WARRANTS ONLY THAT IMSL TESTING HAS BEEN APPLIED TO THIS CODE. NO OTHER WARRANTY, EXPRESSED OR IMPLIED, IS APPLICABLE.

Apêndice E

Segundas diferenças para estados de simetria A1, A2 e E1 do Henon-Heiles

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	3.9914642342909	3.9912638120174	3.9910609533868	0.06104
2	5.9284379701081	5.9267776617251	5.9250979303889	0.32772
3	7.0026258530824	7.0025780084443	7.0025239453817	0.08880
4	7.8405959646155	7.8369149451404	7.8331919052128	0.53619
5	8.8958628850429	8.8931470458369	8.8903819703138	0.55364
6	9.7280896360769	9.7218344918968	9.7155093170424	0.72034
7	10.0323776599811	10.0327935593331	10.0331956382718	0.13775
8	10.7609528841967	10.7548229464174	10.7485866771617	0.98869
9	11.5908026722003	11.5813997212663	11.5718907263471	0.91564
10	11.8802963454254	11.8766882442645	11.8729850901626	0.80033
11	12.5968757551795	12.5865165450547	12.5759754816880	1.44483
12	13.0777544245983	13.0787511646214	13.0797078575099	0.30620
13	13.4278905684445	13.4146648006817	13.4012777545671	1.20225
14	13.7000709011878	13.6917530320009	13.6832556317551	1.31124
15	14.4020066211327	14.3864693647337	14.3706448863407	1.99647
16	14.8736696721862	14.8687099428441	14.8635386031293	1.42319
17	15.2368187765816	15.2187967007534	15.2005067107507	1.76042
18	15.4930753587700	15.4795520017300	15.4657826563166	1.58912
19	16.1355478468270	16.1363244946419	16.1276424607865	58.61732
20	16.1738847092760	16.1525771382104	16.1401536136893	-55.00080
21	16.6402461001974	16.6286277410761	16.6166312707054	2.27386
22	17.0117122275917	16.9872555658113	16.9623114360831	2.86961
23	17.2628200069361	17.2439894803824	17.2248928385092	1.54324
24	17.8668974590611	17.8558210542810	17.8366822513797	45.15277
25	17.9094599545403	17.8829416630935	17.8632569376656	-38.21276
26	18.3780002165779	18.3589891983138	18.3393874893318	3.21745
27	18.7421813729797	18.7086994088912	18.6743598467056	4.58395
28	19.0147262564765	18.9907818277201	18.9665369499652	1.58208
29	19.2012421628110	19.2019520890948	19.2021898980000	2.45869
30	19.5609525838573	19.5313315484797	19.4949331227409	34.70009
31	19.6093090481020	19.5818464861813	19.5593172702703	-25.19347
32	20.0862682882956	20.0584931491395	20.0295546498686	5.79984
33	20.4158628988663	20.3701581170089	20.3231730977357	6.28487
34	20.7489466722546	20.7189431171472	20.6881063715323	4.02139
35	20.8565619848854	20.8433262426311	20.8289132812366	5.64794
36	21.1957872362170	21.1438060677211	21.0876249725314	19.86363
37	21.2854696402722	21.2568259250779	21.2295088167101	-6.24085
38	21.7571720505796	21.7152493588798	21.6691403794180	19.27810
39	22.0234597902955	21.9632266626993	21.9022466282056	3.40072

Tabela 1. Segundas diferenças para 39 níveis pertencentes a simetria A_2 com k_{max}= 80, b=.088 e δ b=.001

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	1.9940405864681	1.9939010413568	1.9937598182538	0.08416
2	2.9913121653471	2.9911043729114	2.9908938697106	0.09063
3	3.9556437659750	3.9546019993872	3.9535475079826	0.32177
4	4.9397716019908	4.9383414718562	4.9368929848198	0.37172
5	4.9927063037449	4.9925019927277	4.9922935798004	0.08216
6	5.8910009702876	5.8884214075688	5.8858092210829	0.55403
7	5.9966528265817	5.9965107353842	5.9963637416966	0.08176

8	6.8614703705018	6.8581486401689	6.8547820753541	0.65374
9	6.9144783205361	6.9123928923630	6.9102779599729	0.42683
10	7.7992583871709	7.7944507103998	7.7895784355897	0.82877
11	7.9044778042604	7.9020845190708	7.8996536396154	0.47575
12	8.0106841512744	8.0107685537115	8.0108453249168	0.09526
13	8.7549146373070	8.7489243369654	8.7428447896429	1.02009
14	8.8099853249162	8.8054057056571	8.8007652263090	0.69117
15	9.0206119269810	9.0208513945358	9.0210807434608	0.11217
16	9.6788061968591	9.6709583782019	9.6629932176802	1.21334
17	9.7854676287126	9.7801745175594	9.7748033825767	0.79778
18	9.8895314702762	9.8865506864618	9.8835104210431	0.60164
19	10.6172547661440	10.6076055930895	10.5977909122937	1.56027
20	10.6801004533826	10.6724877103141	10.6647810903633	0.87962
21	10.8842628228684	10.8809779841136	10.8776179620892	0.69096
22	11.0458827487098	11.0464887531100	11.0470753051098	0.17610
23	11.5265984869742	11.5146496667468	11.5024911738077	1.82092
24	11.6400535686512	11.6312578920976	11.6223390264386	1.05912
25	11.7407770762931	11.7340470780879	11.7271978273155	1.01630
26	12.0610451823168	12.0618483863253	12.0626238528574	0.22996
27	12.4443390536449	12.4297584197668	12.4148878627834	2.33249
28	12.5257695147450	12.5146003666606	12.5032963264691	1.07788
29	12.7199183181763	12.7124074217553	12.7047484160334	1.16508
30	12.8772976533505	12.8733122577079	12.8692038765522	0.95535
31	13.3377279870277	13.3202288763809	13.3023609973513	2.76848
32	13.4685853483776	13.4556560921773	13.4425418687220	1.37464
33	13.5651035825961	13.5540417332515	13.5428046867745	1.29258
34	13.8751942854658	13.8707708586990	13.8661872471225	1.15484
35	14.0958842882202	14.0970545508221	14.0981642352892	0.42972
36	14.2315582830454	14.2104616224371	14.1888794838781	3.41634
37	14.3460565306200	14.3305933124357	14.3149200980865	1.46537
38	14.5282071622955	14.5158626072910	14.5032993503386	1.50664
39	14.6799849975759	14.6706880436900	14.6611599065079	1.57582
40	15.1059236887358	15.0810217678917	15.0554469370711	4.46197
41	15.1153643921656	15.1166169393267	15.1178223310968	0.31194
42	15.2689129251999	15.2508331225918	15.2324457864597	2.01650
43	15.3647161667003	15.3489975543976	15.3330732309896	1.34023
44	15.6602945857857	15.6499255304065	15.6392610783401	1.88753
45	15.8723646897232	15.8666819891788	15.8606556336140	2.16589
46	15.9736762376049	15.9440491229121	15.9136723525052	4.70179
47	16.1364867210772	16.1154494806592	16.0940429398221	2.29159
48	16.3108068979027	16.2931985275382	16.2753108593692	1.71420
49	16.4547120422536	16.4394844933463	16.4239171120356	2.06717
50	16.8244255434138	16.7895790002296	16.7536557417190	6.41300
51	16.8711447777195	16.8645454877207	16.8575471354938	2.36628
52	17.0337772904268	17.0087813524830	16.9832732229342	3.01134
53	17.1423980368294	17.1224162137388	17.1017935066623	3.74295
54	17.1582919674708	17.1591609901567	17.1602376823326	-1.21025
55	17.4171164911288	17.4001309245290	17.3826768263055	2.69269
56	17.6187327766460	17.6037140417129	17.5758519770701	72.95807
57	17.6642836158444	17.6251704554962	17.5970836718672	-62.56040
58	17.8880998512523	17.8593414200618	17.8299240169583	3.68979
59	18.0695844938735	18.0462152941811	18.0224051639373	2.44334
60	18.1793604764866	18.1804033401434	18.1593885836883	121.32635
61	18.2031939639853	18.1816918123809	18.1814744199540	-117.06699
62	18.4848170838679	18.4366243777608	18.3866745941229	9.53036
63	18.5976445439394	18.5825360579596	18.5666074528445	4.41339
64	18.7533753102242	18.7193055240489	18.6845491063300	3.66804
65	18.8635673456788	18.8514070995506	18.8344632669168	25.37522
66	18.9047947809209	18.8817448561791	18.8622447677564	-18.80036

67	19.1464497406247	19.1215551521501	19.0949815129610	8.78093
68	19.2878545711283	19.2326257092437	19.1755855645361	9.41776
69	19.3415198920951	19.3195499984235	19.2972922452274	1.48999
70	19.5890511263400	19.5497296071927	19.5093872531630	5.22173
71	19.7977608425625	19.7661034593354	19.7324602600136	10.04657
72	19.8647824210221	19.8534885749417	19.8409432204690	6.30372
73	19.9283220066271	19.8993651029533	19.8687625053592	8.27008
74	20.0760963741113	20.0106385472289	19.9440590992040	5.60512
75	20.2223232009949	20.2219840944215	20.2207777906485	4.28839
76	20.2937791053022	20.2679933595958	20.2396026635230	12.85253
77	20.4197724278036	20.3751156646632	20.3306666522094	-1.01963
78	20.5465775052518	20.5248200345322	20.4992397243394	18.62545
79	20.6321479156955	20.5971999902110	20.5589786278649	15.89263
80	20.8204960766428	20.7496786906209	20.6739414254033	23.71063
81	20.8691867146485	20.8307076069672	20.7955709753315	-16.04591
82	21.0304754423748	20.9993009328838	20.9662489388840	8.94070
83	21.2288192527661	21.1766027989178	21.1233250948163	5.01143
84	21.2415641752980	21.2388571030003	21.2346077653270	7.26153
85	21.4543903912443	21.3860216891070	21.2915587475936	122.01540
86	21.5295634370275	21.4885486175613	21.4373282045305	47.49317
87	21.5908797226544	21.5380874012498	21.5056918015571	-94.70071

Tabela 2. Segundas diferenças para 87 níveis pertencentes a simetria E_1 com k_{max}= 80, b=.088 e δ b=.001.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	1.9940405864020	1.9939010412899	1.9937598181860	0.08416
2	2.9913121652486	2.9911043728117	2.9908938696095	0.09063
3	3.9556437654813	3.9546019988874	3.9535475074767	0.32177
4	4.9397716013132	4.9383414711699	4.9368929841247	0.37172
5	4.9927063036484	4.9925019926293	4.9922935797001	0.08216
6	5.8910009690653	5.8884214063310	5.8858092198295	0.55403
7	5.9966528265151	5.9965107353153	5.9963637416253	0.08176
8	6.8614703689285	6.8581486385743	6.8547820737381	0.65374
9	6.9144783195487	6.9123928913615	6.9102779589573	0.42683
10	7.7992583848937	7.7944507080920	7.7895784332509	0.82877
11	7.9044778031280	7.9020845179206	7.8996536384472	0.47575
12	8.0106841513165	8.0107685537499	8.0108453249515	0.09526
13	8.7549146344716	8.7489243340878	8.7428447867224	1.02009
14	8.8099853227469	8.8054057034588	8.8007652240817	0.69117
15	9.0206119270975	9.0208513946476	9.0210807435677	0.11217
16	9.6788061931447	9.6709583744319	9.6629932138539	1.21334
17	9.7854676262071	9.7801745150168	9.7748033799968	0.79778
18	9.8895314688688	9.8865506850263	9.8835104195788	0.60164
19	10.6172547615818	10.6076055884491	10.5977909075737	1.56027
20	10.6801004497748	10.6724877066616	10.6647810866660	0.87962
21	10.8842628213196	10.8809779825294	10.8776179604686	0.69096
22	11.0458827490032	11.0464887533944	11.0470753053846	0.17610
23	11.5265984813257	11.5146496609995	11.5024911679592	1.82092
24	11.6400535644863	11.6312578878741	11.6223390221562	1.05912
25	11.7407770731120	11.7340470748505	11.7271978240207	1.01630
26	12.0610451827059	12.0618483867018	12.0626238532201	0.22996
27	12.4443390467602	12.4297584127456	12.4148878556221	2.33249
28	12.5257695094512	12.5146003613026	12.5032963210466	1.07788
29	12.7199183146296	12.7124074181387	12.7047484123454	1.16508
30	12.8772976514786	12.8733122557785	12.8692038745629	0.95535
31	13.3377279787694	13.3202288679497	13.3023609887413	2.76848
32	13.4685853422561	13.4556560859683	13.4425418624241	1.37464

33	13.5651035773630	13.5540417279351	13.5428046813742	1.29258
34	13.8751942833935	13.8707708565521	13.8661872448973	1.15484
35	14.0958842887916	14.0970545513662	14.0981642358027	0.42972
36	14.2315582730990	14.2104616122630	14.1888794734686	3.41634
37	14.3460565232960	14.3305933050125	14.3149200905622	1.46537
38	14.5282071564608	14.5158626013528	14.5032993442952	1.50664
39	14.6799849931966	14.6706880392023	14.6611599019081	1.57582
40	15.1059236770763	15.0810217558513	15.0554469247204	4.46196
41	15.1153643927139	15.1166169399215	15.1178223316490	0.31194
42	15.2689129166510	15.2508331138979	15.2324457776176	2.01650
43	15.3647161592543	15.3489975468532	15.3330732233473	1.34023
44	15.6602945809097	15.6499255253927	15.6392610731822	1.88753
45	15.8723646870851	15.8666819863935	15.8606556306411	2.16589
46	15.9736762236578	15.9440491086047	15.9136723378509	4.70179
47	16.1364867111319	16.1154494705408	16.0940429295245	2.29159
48	16.3108068895723	16.2931985190756	16.2753108507725	1.71420
49	16.4547120350718	16.4394844860052	16.4239171045296	2.06717
50	16.8244255270588	16.7895789833763	16.7536557243750	6.41300
51	16.8711447746531	16.8645454844852	16.8575471320491	2.36628
52	17.0337772786298	17.0087813404421	16.9832732106501	3.01134
53	17.1423980276999	17.1224162040080	17.1017934967524	3.74295
54	17.1582919675861	17.1591609906763	17.1602376828233	-1.21025
55	17.4171164831364	17.4001309163253	17.3826768178784	2.69269
56	17.6187327701558	17.6037140333267	17.5758519600351	72.95811
57	17.6642835971302	17.6251704381741	17.5970836632721	-62.56044
58	17.8880998376945	17.8593414061976	17.8299240027816	3.68979
59	18.0695844828700	18.0462152830673	18.0224051529142	2.44334
60	18.1793604771116	18.1804033393455	18.1593885734855	121.32640
61	18.2031939538128	18.1816918033763	18.1814744203082	-117.06703
62	18.4848170662886	18.4366243684879	18.3866746104658	9.53027
63	18.5976445369084	18.5825360505789	18.5666074450392	4.41339
64	18.7533752942011	18.7193055077500	18.6845490899135	3.66804
65	18.8635673407073	18.8514070938452	18.8344632655040	25.37520
66	18.9047947706468	18.8817448491809	18.8622447673679	-18.80038
67	19.1464497316817	19.1215551530385	19.0949815795095	8.78064
68	19.2878546552778	19.2326259998456	19.1755864326046	9.41583
69	19.3415198861281	19.3195499927362	19.2972922414565	1.48998
70	19.5890511089098	19.5497295910309	19.5093872412242	5.22172
71	19.7977608858245	19.7661036860105	19.7324613680577	10.04304
72	19.8647824199158	19.8534885890288	19.8409434200596	6.30286
73	19.9283220487489	19.8993653701146	19.8687642886865	8.26359
74	20.0760986221998	20.0106449499321	19.9440768628974	5.56911
75	20.2223232010491	20.2219840943322	20.2207777919137	4.28838
76	20.2937790958748	20.2679933569507	20.2396026986493	12.85238
77	20.4197724313859	20.3751157080068	20.3306668062407	-1.01998
78	20.5465776175879	20.5248210618635	20.4992519114112	18.57553
79	20.6321499612723	20.5972104406344	20.5590405986596	15.68330
80	20.8205243260999	20.7497795782978	20.6742273163728	23.16899
81	20.8691976672589	20.8307173188605	20.7955844468305	-16.06990
82	21.0304756221347	20.9993013406459	20.9662500257752	8.93855
83	21.2288197225979	21.1766041256883	21.1233288759098	5.00388
84	21.2415641971260	21.2388573093697	21.2346201111495	7.20524
85	21.4545284346591	21.3868573830767	21.2952662841631	111.84461
86	21.5296566514634	21.4890759355856	21.4386831823491	45.66058
87	21.5912114726492	21.5384707540401	21.5060659086220	-94.41651

Tabela 3. Segundas diferenças para 87 níveis pertencentes a simetria E_1 com k_{max}= 68, b=.088 e δ b=.001.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	0.9991530722361	0.9991333482174	0.9991133921182	0.02323
2	2.9736826934292	2.9730680015099	2.9724459792772	0.24656
3	3.9903061511917	3.9900491944443	3.9897876643379	0.11462
4	4.9222745703977	4.9204466005897	4.9185961796221	0.45628
5	5.9236046243627	5.9217027682917	5.9197719234330	0.48953
6	6.8442862407318	6.8405896906184	6.8368456722813	0.69392
7	7.0027172168996	7.0026763102673	7.0026296296141	0.08245
8	7.8279636201689	7.8236353563178	7.8192381563492	0.88113
9	8.7386259676783	8.7323296873865	8.7259460660048	1.00020
10	8.8965685951224	8.8939085118593	8.8912030091606	0.51068
11	9.7016306180668	9.6939837064667	9.6862058640382	1.35064
12	10.0323695049556	10.0327845173214	10.0331856162007	0.13868
13	10.6032075978745	10.5934137360635	10.5834651186453	1.46087
14	10.7640497372204	10.7581724218003	10.7522068868635	0.82002
15	11.5422669895373	11.5302416439932	11.5179894227757	1.96766
16	11.8801986366163	11.8765792264654	11.8728634712686	0.81122
17	12.4342249770250	12.4197154805429	12.4049313489569	2.21128
18	12.6068362542221	12.5972986558926	12.5876382017805	0.97525
19	13.0777545421899	13.0787509843718	13.0797071507427	0.30795
20	13.3466094750622	13.3288816212926	13.3107751097704	2.84088
21	13.6994255923234	13.6910286430207	13.6824424451035	1.38228
22	14.2258813618959	14.2049747734076	14.1835882440273	3.37868
23	14.4275270162377	14.4140536296965	14.4004335299371	1.01785
24	14.8736718909800	14.8687069463224	14.8635260505992	1.45239
25	15.1100479970293	15.0848827231947	15.0590954276308	4.12348
26	15.4900110427681	15.4760955600508	15.4618833082722	1.91760
27	15.9711934533669	15.9416824244152	15.9113575634787	5.10506
28	16.1357412195470	16.1370794332300	16.1382359639071	1.12587
29	16.2280426582410	16.2103804440439	16.1925884825416	0.80040
30	16.6402547864592	16.6285719349146	16.6164481299609	2.65178
31	16.8262220230049	16.7913085500938	16.7554215366652	5.79788
32	17.2514308341753	17.2311171071395	17.2103370609279	2.70626
33	17.6624707852218	17.6214424001959	17.5790479475590	7.75230
34	17.8688441526446	17.8610420375732	17.8526134653575	3.50739
35	18.0074647639915	17.9849858209905	17.9623017708308	1.14044
36	18.3775788294614	18.3573987177909	18.3347016237015	13.71100
37	18.4872490376821	18.4403805107554	18.3937237826185	-1.14856
38	18.9807948930799	18.9523740192863	18.9228919689973	5.59917
39	19.2012153982682	19.2019223754203	19.1746030344362	145.95579
40	19.2899799245080	19.2333953454357	19.2021573318269	-131.78414
41	19.5736378786658	19.5564957451901	19.5384086445722	4.83199
42	19.7597463135624	19.7304236697885	19.7001483313088	4.82856
43	20.0557886765944	19.9947807278206	19.9267967126771	34.88944
44	20.1127272576810	20.0807930753626	20.0522080659147	-16.67849
45	20.6645027515839	20.6191447284037	20.5649211172216	42.99688
46	20.8415236176035	20.7677699807518	20.6950113146764	-4.79094
47	20.8560435248508	20.8420414918990	20.8273403446474	3.35435
48	21.2492307555518	21.2212301391988	21.1905118319694	12.80647
49	21.4544492491746	21.3897745382378	21.2985475216176	124.13551
50	21.5781426316731	21.5041888020869	21.4451213248705	-69.22536

Tabela 4. Segundas diferenças para 50 níveis pertencentes a simetria A_1 com k_{max}= 80, b=.088 e δ b=.001.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	0.9991530722361	0.9991333482174	0.9991133921182	0.02323
2	2.9736826934292	2.9730680015099	2.9724459792772	0.24656
3	3.9903061511917	3.9900491944443	3.9897876643379	0.11462
4	4.9222745703977	4.9204466005897	4.9185961796221	0.45628
5	5.9236046243627	5.9217027682917	5.9197719234330	0.48953
6	6.8442862407318	6.8405896906185	6.8368456722814	0.69392
7	7.0027172168996	7.0026763102673	7.0026296296141	0.08245
8	7.8279636201689	7.8236353563178	7.8192381563492	0.88113
9	8.7386259676783	8.7323296873865	8.7259460660048	1.00020
10	8.8965685951224	8.8939085118593	8.8912030091606	0.51068
11	9.7016306180668	9.6939837064667	9.6862058640382	1.35064
12	10.0323695049556	10.0327845173214	10.0331856162007	0.13868
13	10.6032075978744	10.5934137360635	10.5834651186453	1.46087
14	10.7640497372204	10.7581724218003	10.7522068868635	0.82002
15	11.5422669895373	11.5302416439932	11.5179894227757	1.96766
16	11.8801986366163	11.8765792264654	11.8728634712686	0.81122
17	12.4342249770250	12.4197154805428	12.4049313489569	2.21128
18	12.6068362542221	12.5972986558926	12.5876382017805	0.97525
19	13.0777545421899	13.0787509843718	13.0797071507427	0.30795
20	13.3466094750621	13.3288816212926	13.3107751097704	2.84088
21	13.6994255923234	13.6910286430207	13.6824424451035	1.38228
22	14.2258813618959	14.2049747734076	14.1835882440273	3.37868
23	14.4275270162377	14.4140536296965	14.4004335299371	1.01785
24	14.8736718909800	14.8687069463224	14.8635260505991	1.45239
25	15.1100479970293	15.0848827231947	15.0590954276308	4.12348
26	15.4900110427681	15.4760955600508	15.4618833082722	1.91760
27	15.9711934533671	15.9416824244158	15.9113575634800	5.10506
28	16.1357412195470	16.1370794332300	16.1382359639071	1.12587
29	16.2280426582411	16.2103804440440	16.1925884825419	0.80040
30	16.6402547864592	16.6285719349148	16.6164481299616	2.65178
31	16.8262220230113	16.7913085501112	16.7554215367136	5.79788
32	17.2514308341774	17.2311171071458	17.2103370609479	2.70626
33	17.6624707854101	17.6214424007219	17.5790479490504	7.75230
34	17.8688441526449	17.8610420375746	17.8526134653644	3.50739
35	18.0074647640286	17.9849858211046	17.9623017711946	1.14043
36	18.3775788296623	18.3573987188521	18.3347016307041	13.71097
37	18.4872490425390	18.4403805240015	18.3937238168369	-1.14863
38	18.9807948957447	18.9523740288453	18.9228920056368	5.59907
39	19.2012153982682	19.2019223754225	19.1746039963267	145.95078
40	19.2899800400804	19.2333956754968	19.2021573318283	-131.78131
41	19.5736378791474	19.5564957477055	19.5384086586122	4.83194
42	19.7597463568712	19.7304238386904	19.7001490662645	4.82632
43	20.0557903987634	19.9947868263611	19.9268158238424	34.84623
44	20.1127278850928	20.0807937685451	20.0522090713425	-16.67972
45	20.6645068788003	20.6191656284075	20.5650366603211	42.61917
46	20.8415590913397	20.7678716227791	20.6952710963338	-5.23377
47	20.8560456159920	20.8420417738258	20.8273407658289	3.34500
48	21.2492316313167	21.2212372612466	21.1906064724951	12.42349
49	21.4545841949132	21.3906030193948	21.3022974528632	113.71531
50	21.5786002294766	21.5051082547017	21.4466805334043	-70.04965

Tabela 5. Segundas diferenças para 50 níveis pertencentes a simetria A_1 com k_{max}= 68, b=.088 e δ b=.001.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	1.9902577590589	1.9900773734794	1.9898952258212	0.08854
2	2.9856036192686	2.9853273680948	2.9850480337852	0.10328
3	3.9273235636437	3.9259683303730	3.9245993513960	0.35012
4	4.9005478130060	4.8986506603514	4.8967321712397	0.43556
5	4.9865763137642	4.9862521225047	4.9859216895634	0.12518
6	5.8204339497437	5.8170306792855	5.8135900650142	0.64197
7	5.9916318288981	5.9913279995600	5.9910148277015	0.15593
8	6.7693982975796	6.7648819441170	6.7603074722898	0.85912
9	6.8563050532317	6.8534403834862	6.8505388311891	0.53816
10	7.6660453425659	7.6595077788988	7.6528849021701	1.11368
11	7.8361994395769	7.8327469608914	7.8292404304120	0.69007
12	8.0096666572625	8.0094256283615	8.0091618061125	0.28458
13	8.5849790511027	8.5763808209147	8.5676407036546	1.65439
14	8.6840344894927	8.6779495721841	8.6717996789411	0.74875
15	9.0219715766363	9.0217242066772	9.0214392882918	0.41620
16	9.4554780494888	9.4440934806766	9.4325059169848	2.14944
17	9.6367856914118	9.6294188881387	9.6219541711563	1.01682
18	9.7990500104471	9.7941342744075	9.7891026228283	1.18352
19	10.3334338031262	10.3183943792744	10.3030235104750	3.21218
20	10.4733657910665	10.4634979815546	10.4535314487274	0.94350
21	10.7799751881583	10.7739986604361	10.7678402431161	1.68823
22	11.0503922502822	11.0496755661750	11.0487552017446	1.84331
23	11.1708908288976	11.1517089268260	11.1321191245349	3.65774
24	11.3951259876724	11.3830483058928	11.3708040293073	1.46353
25	11.5437740091684	11.5335465143306	11.5231277931600	1.65800
26	11.9935495538242	11.9681662658249	11.9418912241044	7.45105
27	12.0663457298156	12.0650432341707	12.0635621383493	1.48031
28	12.2206023510390	12.2057530404304	12.1907264134363	1.45273
29	12.4927170930241	12.4802443690072	12.4673524037682	3.35924
30	12.7270001187322	12.7116881469017	12.6901248860435	49.17749
31	12.7887562866541	12.7615225764963	12.7387276551153	-34.78260
32	13.1003697275313	13.0812576444628	13.0617244040664	3.21955
33	13.2500780696637	13.2333169051539	13.2155473305276	7.62024

Tabela 6. Segundas diferenças para 33 níveis pertencentes a simetria E_1 com k_{max}= 56, b=.1118 e δ b=.001.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	1.9902577617466	1.9900773761935	1.9898952285617	0.08854
2	2.9856036233818	2.9853273722540	2.9850480379908	0.10328
3	3.9273235838326	3.9259683507672	3.9245993719965	0.35012
4	4.9005478412526	4.8986506889162	4.8967322001253	0.43556
5	4.9865763185720	4.9862521274051	4.9859216945582	0.12518
6	5.8204340004216	5.8170307305204	5.8135901168104	0.64197
7	5.9916318333786	5.9913280041785	5.9910148324617	0.15593
8	6.7693983647707	6.7648820121719	6.7603075412214	0.85912
9	6.8563050958493	6.8534404266531	6.8505388749111	0.53816
10	7.6660454398195	7.6595078719182	7.6528850019783	1.11368
11	7.8361994908699	7.8327470129865	7.8292404833238	0.69007
12	8.0096666607059	8.0094256321384	8.0091618102385	0.28458
13	8.5849791787990	8.5763809507086	8.5676408356029	1.65439
14	8.6840345801143	8.6779496637784	8.6717997715089	0.74875
15	9.0219715800697	9.0217242106570	9.0214392928502	0.41620
16	9.4554782185316	9.4440936527561	9.4325060922378	2.14944
17	9.6367858009986	9.6294189991941	9.6219542837010	1.01682
18	9.7990500832150	9.7941343488906	9.7891026990969	1.18352

19	10.3334340292844	10.3183946126753	10.3030237530431	3.21216
20	10.4733659383161	10.4634981304273	10.4535315993376	0.94350
21	10.7799752769797	10.7739987524730	10.7678403390369	1.68822
22	11.0503922606597	11.0496755804559	11.0487552233446	1.84328
23	11.1708912269544	11.1517094135865	11.1321197606734	3.65719
24	11.3951261786859	11.3830485073402	11.3708042471732	1.46348
25	11.5437741914242	11.5335467258273	11.5231280586805	1.65779
26	11.9935534825191	11.9681729113735	11.9419027414848	7.43304
27	12.0663457784744	12.0650432847756	12.0635621968003	1.48026
28	12.2206026667721	12.2057534254661	12.1907269195288	1.45230
29	12.4927187963739	12.4802477960685	12.4673598025772	3.34123
30	12.7270131532916	12.7117351563014	12.6902790868232	48.60133
31	12.7888287983708	12.7616280049372	12.7388496985007	-34.65457
32	13.1003732598414	13.0812637862704	13.0617357119280	3.20000
33	13.2501271086490	13.2334307759840	13.2158354704084	6.79320

Tabela 7. Segundas diferenças para 33 níveis pertencentes a simetria E_1 com k_{max}= 44, b=.1118 e δ b=.001.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	0.9986201766659	0.9985948590626	0.9985693029058	0.02389
2	2.9570385196208	2.9562456967759	2.9554451960228	0.25972
3	3.9828052335642	3.9824186085155	3.9820254085997	0.16510
4	4.8725350618318	4.8701521463357	4.8677447801655	0.50205
5	~~5.8697256912919~~	~~5.8670240593650~~	~~5.8642825197756~~	~~0.68020~~
6	6.7428462419488	6.7379330260585	6.7329633792543	0.83751
7	6.9996449139437	6.9993878053926	6.9991168867566	0.19730
8	7.7040397029158	7.6977429409147	7.6913437511223	1.33062
9	8.5627850690659	8.5540531174266	8.5451936866361	1.49028
10	8.8192026666567	8.8152021906041	8.8111292128950	0.82246
11	9.4784409188083	9.4668126055985	9.4549594977098	2.37456
12	10.0357708105918	10.0354142575211	10.0349869627776	0.70492
13	10.3199715350109	10.3051916492490	10.2901053711874	2.97318
14	10.5986945585697	10.5904983608408	10.5821916736681	1.04329
15	11.1800767143563	11.1603257389388	11.1400628360650	4.58703
16	11.7573743337657	11.7495455719666	11.7412816615059	3.70354
17	11.9909430800190	11.9661655774375	11.9407129864016	5.64164
18	12.3464604141647	12.3338233048452	12.3209707380461	1.74688
19	12.7821159411311	12.7483171571840	12.7130163435915	11.78218
20	13.0791397022002	13.0769921489817	13.0744566850821	2.96636

Tabela 8. Segundas diferenças para 20 níveis pertencentes a simetria A_1 com k_{max}= 56, b=.1118 e δ b=.001.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	0.9986201766659	0.9985948590626	0.9985693029058	0.02389
2	2.9570385196209	2.9562456967759	2.9554451960228	0.25972
3	3.9828052335642	3.9824186085155	3.9820254085997	0.16510
4	4.8725350618318	4.8701521463357	4.8677447801655	0.50205
5	5.8697256912919	5.8670240593650	5.8642825197756	0.68020
6	6.7428462419488	6.7379330260585	6.7329633792543	0.83751
7	6.9996449139437	6.9993878053926	6.9991168867566	0.19730
8	7.7040397029158	7.6977429409148	7.6913437511224	1.33062
9	8.5627850690672	8.5540531174288	8.5451936866398	1.49028

10	8.8192026666572	8.8152021906050	8.8111292128966	0.82246
11	9.4784409188957	9.4668126057449	9.4549594979560	2.37455
12	10.0357708106064	10.0354142575492	10.0349869628325	0.70492
13	10.3199715380547	10.3051916544313	10.2901053800567	2.97317
14	10.5986945598101	10.5904983630102	10.5821916774955	1.04328
15	11.1800768401817	11.1603259556079	11.1400632119794	4.58642
16	11.7573744151141	11.7495457446660	11.7412820398822	3.70256
17	11.9909464505986	11.9661714786604	11.9407234127609	5.62497
18	12.3464617460119	12.3338258569041	12.3209757717781	1.73666
19	12.7822034409567	12.7484735812524	12.7133006938054	11.31922
20	13.0791397903913	13.0769924606727	13.0744577929727	2.96198

Tabela 9. Segundas diferenças para 20 níveis pertencentes a simetria A_1 com k_{max}= 44, b=.1118 e δ b=.001.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	3.9860218292704	3.9857618142417	3.9854992129409	0.06489
2	5.8835858897345	5.8814533816689	5.8793004431779	0.34737
3	6.9992150630308	6.9989329123540	6.9986358321727	0.21331
4	7.7415820211584	7.7369007196044	7.7321774900923	0.54192
5	8.8155728217611	8.8113416553516	8.8070256804073	0.96249
6	9.5603183086070	9.5524092169242	9.5444308085284	0.72565
7	10.0359196736034	10.0355935537855	10.0352050763765	0.62136
8	10.5818140275666	10.5725117668383	10.5630409384035	1.59440
9	11.3373742284739	11.3252726127524	11.3130358043062	1.19373
10	11.7596283380410	11.7523222121803	11.7447514990967	2.25136
11	12.2931015591074	12.2772460586708	12.2610890116348	2.45614
12	13.0486717368697	13.0321197808561	13.0140078160318	11.97049
13	13.0910571295256	13.0868850497090	13.0835142118724	-6.12248

Tabela 10. Segundas diferenças para 13 níveis pertencentes a simetria A_2 com k_{max}= 56, b=.1118 e δ b=.001.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	3.9860218292704	3.9857618142417	3.9854992129409	0.06489
2	5.8835858897345	5.8814533816689	5.8793004431779	0.34737
3	6.9992150630308	6.9989329123540	6.9986358321727	0.21331
4	7.7415820211584	7.7369007196044	7.7321774900923	0.54192
5	8.8155728217611	8.8113416553516	8.8070256804074	0.96249
6	9.5603183086073	9.5524092169247	9.5444308085292	0.72565
7	10.0359196736036	10.0355935537860	10.0352050763773	0.62136
8	10.5818140275932	10.5725117668805	10.5630409384708	1.59440
9	11.3373742289899	11.3252726135754	11.3130358056237	1.19372
10	11.7596283389955	11.7523222137920	11.7447515018329	2.25136
11	12.2931015908287	12.2772461100141	12.2610890951273	2.45604
12	13.0486722073256	13.0321206295378	13.0140092841411	11.96864
13	13.0910571970530	13.0868850951895	13.0835142416657	-6.12253

Tabela 11. Segundas diferenças para 13 níveis pertencentes a simetria A_2 com k_{max}= 44, b=.1118 e δ b=.001.

Apêndice F

Segundas diferenças para o hamiltoniano de Pullen e Edmonds

i	$E_i(b - \delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b + \delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	5.1759157693145	5.1719499907003	5.1679703888274	0.26727
2	7.3591701292987	7.3515575375158	7.3439003956066	0.60600
3	9.3891626920091	9.3805751342183	9.3719501367612	0.39912
4	9.7134048821230	9.6986688980796	9.6838346397101	1.01328
5	11.5230868158763	11.5121428647233	11.5011325454932	0.57650
6	12.1253542488746	12.1029947739681	12.0804563201601	1.47880
7	13.6087709161154	13.5960096125514	13.5831701550213	0.57483
8	14.0461464883808	14.0241169856212	14.0019587961977	0.91761
9	14.6326611065110	14.6011009278866	14.5692615724633	1.91203
10	15.7069618614732	15.6924704497760	15.6778838354186	0.60668
11	16.4095879685332	16.3815828614697	16.3533618115197	1.31821
12	17.2150728546670	17.1733273532097	17.1311795942471	2.34234
13	17.7966512889215	17.7804768853964	17.7641943357251	0.60823
14	18.5147443219395	18.4833277782063	18.4516998931305	1.14342
15	18.9664693819307	18.9280207443494	18.8892643853760	1.62575
16	19.8685066005646	19.8169658923503	19.7637705126238	8.34977
17	19.8865440616808	19.8673936481021	19.8492345374362	-4.98960
18	20.7810544931947	20.7457916263454	20.7102529269703	1.32958
19	21.5412536993017	21.4934244282727	21.4451410897426	2.11259
20	21.9702397788597	21.9508346578126	21.9313111425999	0.53936
21	22.5927965646933	22.5279350621919	22.4623574317118	3.17884
22	22.9670600137955	22.9279817496062	22.8885977143458	1.33362
23	23.5203316622627	23.4697399015366	23.4187712287541	1.60595
24	24.0527228555081	24.0316095502822	24.0101939478256	1.25792
25	24.2080753275670	24.1491933376442	24.0899028547701	1.69154
26	25.1711506707081	25.1288819583456	25.0862190581534	1.56866
27	25.3796818385653	25.3020649171729	25.2235932323418	3.37824
28	26.0115076821702	25.9551297419121	25.8978457626352	3.49079
29	26.1388049341028	26.1152181690047	26.0919085382360	-1.06120
30	26.9296383375230	26.8592051457063	26.7879762366812	2.96255
31	27.3625317703727	27.3168338602141	27.2707684058284	1.34549
32	28.1846838775366	28.1204876147523	28.0366911668610	69.70073
33	28.2215699700371	28.1491630768244	28.0810697366973	-15.32391
34	28.2422747587255	28.2003213113351	28.1719043137617	-48.00105
35	28.7413804034362	28.6705974732131	28.5992112949086	2.10407
36	29.5421765160428	29.4932891698766	29.4435552026241	2.87055
37	29.7222531741011	29.6395978977667	29.5563869042720	1.87491
38	30.2938918042823	30.2677984357712	30.2415141223367	0.63085
39	30.5753673688886	30.5077170017277	30.4395594265404	1.66256
40	31.1258200780653	31.0211358861350	30.9150538911820	4.50597
41	31.4383723276510	31.3581434220263	31.2769342557892	3.12602
42	31.7318731584811	31.6794899978813	31.6268222847997	0.89822
43	32.3760699784820	32.3480665116038	32.3200121806816	0.15724
44	32.5556576201535	32.4606083837031	32.3642446288698	4.04958
45	32.8552108566136	32.7811271078365	32.7065658024962	1.45680
46	33.5060414667446	33.4195219611313	33.3321008399365	2.69787
47	33.8974016089594	33.8431626917929	33.7881628954010	2.24825
48	34.0763457527195	33.9587299072883	33.8391556975546	5.76690
49	34.2555163233652	34.1597274246870	34.0635671233488	1.08725
50	34.4598327654894	34.4292759797075	34.3988886852392	-0.49229

51	35.1339073986525	35.0569701177544	34.9791792967729	2.43472
52	35.4641851075765	35.3545053195353	35.2435198551215	3.69310
53	36.0152688537826	35.9463928178591	35.8703227956148	20.01310
54	36.1489666813216	36.0687164866509	35.9937645077806	-14.68923
55	36.5475118549708	36.5135151329615	36.4799996125441	-1.31787
56	37.0295862022218	36.9144226428141	36.7924832546320	18.35551
57	37.1338458120875	37.0101550104726	36.8898174954821	-9.06045
58	37.4245570124644	37.3411316549671	37.2572410560220	1.24592
59	38.1969194188519	38.1358444985591	38.0680699804731	17.56772
60	38.3553991317550	38.2494875064534	38.1423483487758	3.20928
61	38.4606601055473	38.3471610336267	38.2372084325250	-9.24833
62	38.6430540690486	38.6036913906505	38.5656043088866	-3.30434
63	38.9823373303879	38.8719925213102	38.7606245054148	2.63225
64	39.6583907964657	39.5736752031393	39.4876553389104	3.29580
65	39.9779850325387	39.8572649821469	39.7343777154305	5.43744
66	40.1737201399310	40.0243338144505	39.8738901814880	2.64166
67	40.3585486141067	40.3030806790406	40.2456287715291	4.92263
68	40.7348795623796	40.6817247070739	40.6065146966046	54.21391
69	40.8446528111714	40.7466995052213	40.6713885816388	-55.56863
70	41.4006435318600	41.2639234606987	41.1250770078206	5.15313
71	41.7401703380950	41.6284812525539	41.5134175150032	8.10659
72	41.9757902835017	41.8782709124203	41.7816830349842	-2.22429
73	42.4986802319822	42.4452446339103	42.3895676130469	5.28074
74	42.8595788990516	42.7572688298318	42.6276760219431	63.80842
75	42.8922547972089	42.8121139739904	42.7588709293082	-62.82749
76	43.2139212355297	43.0843121543030	42.9293010224205	58.95893
77	43.2800122835782	43.1252894932597	42.9934742623804	-53.11862
78	43.9152087642648	43.7929433189773	43.6674962437890	7.26517
79	44.1774461223657	44.0831374799421	43.9883787921412	1.02090
80	44.4328104750180	44.2834471625090	44.1314423188872	5.96505
81	44.6215601013008	44.5647535987857	44.4594506781442	108.82236
82	44.7477279961943	44.6129861911799	44.5241482756762	-102.89356
83	45.0082494236567	44.9437519478726	44.8818650582456	-5.80856
84	45.5227751187174	45.4063837339895	45.2884834327932	3.32314
85	45.9376742899592	45.7900944245709	45.6406466236068	4.07934
86	46.3199051825363	46.2274949631304	46.0503619041401	183.27370
87	46.4202356171011	46.2384864081248	46.1342650673958	-167.66956
88	46.6399321763301	46.5231251681003	46.3979091701653	18.07486
89	46.7699640187805	46.7035463952889	46.6448819991106	-16.60094
90	47.1751888966734	47.0991659921579	47.0257278184566	-5.48785
91	47.4517164624042	47.2995288163096	47.1427825138965	9.63785
92	47.6774976989659	47.5237285653323	47.3683230670149	3.44326
93	47.9487630684573	47.8163511618568	47.6843149542942	-0.78571
94	48.5332261139779	48.4499628446643	48.3604765540173	12.84422
95	48.8183572937259	48.7059051840835	48.5667043449231	54.91886
96	48.9058731508578	48.8096440220986	48.7303113057176	-34.61695
97	49.1187868406467	48.9673804142814	48.8242268765996	-16.85385
98	49.3642555611241	49.2756252913213	49.1899440408030	-5.98474
99	49.6083317805801	49.4108013862355	49.2082678045839	10.12570
100	49.6413326048361	49.4847557290863	49.3283370451640	-0.31968
101	50.1683268321273	50.0436675200307	49.9167325061609	4.54743
102	50.5429588728888	50.3787989840256	50.2104989721532	8.21799
103	50.7046687163806	50.6279239297033	50.4674880308689	165.30623
104	50.8379079475822	50.6612354283302	50.5612977798384	-151.46664
105	51.0048778646181	50.9323481193615	50.8637576667976	-7.73436
106	51.4602792286668	51.3276458036071	51.1877388478655	14.17079
107	51.5991767343191	51.4869751801875	51.3827734983913	-15.53766
108	52.0425710970380	51.8679895893024	51.6905580319243	5.49481
109	52.3420400501685	52.2059682185476	52.0643368005272	10.64933

110	52.6707622981720	52.5265134440028	52.3748254626779	14.16261
111	52.8439463705070	52.6303508147747	52.4126758361614	7.75108
112	52.8568423589447	52.7854427769435	52.7175562093486	-6.65527
113	53.1944999594105	53.1056307600091	53.0206938532707	-7.40466
114	53.5233451095532	53.3572208140984	53.1873742999689	6.97608
115	53.7607685904932	53.6439690792833	53.5047640307285	41.76711
116	53.9147907148606	53.7343706275332	53.5702409290767	-30.31652
117	54.0819104820429	53.9015481334871	53.7261181696854	-9.15073
118	54.5984486661634	54.4593422733595	54.3107428073821	17.43149
119	54.8395764743317	54.7185182300036	54.5820578539120	28.14793
120	54.9951133399093	54.9097466531191	54.7851107258383	71.51597
121	55.1690288782336	54.9785241959380	54.8396363510002	-93.88545
122	55.3948892959029	55.2927668239108	55.1891802909541	2.64783
123	55.6351520461277	55.4499796258820	55.2675342714370	-4.91806
124	55.9985181948681	55.8782843038436	55.6462414461755	200.09377
125	56.1178947061763	55.8846082609542	55.7602738485788	-194.95893
126	56.2883153140195	56.1300553905822	55.9701248328104	2.97636
127	56.7402445069454	56.5506642551069	56.3576223445858	6.12134
128	56.8756712755270	56.7834822874375	56.6744724270259	29.62283
129	57.0794020029897	56.9755402086697	56.7543915716578	205.85473
130	57.2024075660344	57.0005709722843	56.9227189469835	-217.51461
131	57.4948069338528	57.3533866809766	57.2008720343811	19.34392
132	57.7103673020562	57.5662083411282	57.4353573994369	-23.11776
133	58.2087270370703	58.0244858811907	57.8305755326684	16.66399
134	58.2770132165278	58.1375443736794	58.0042375112058	-10.59897
135	58.5385338053329	58.3549876841332	58.1675347332152	6.69494
136	58.8846718981057	58.7094255109592	58.5259502219141	14.01632
137	59.0196548499947	58.9502087658974	58.8763945789985	7.40982
138	59.3147522278491	59.1758931381308	58.9209456762742	196.17511
139	59.4266790933313	59.1990020053950	59.0893285509865	-199.33382
140	59.6710915797719	59.4946576100929	59.3107384299182	12.58132
141	59.8422911975194	59.7042564887122	59.5685180997136	-3.84616
142	60.1603541606375	59.9627920610822	59.7682237324841	-4.99271
143	60.4712351505795	60.2324774779855	59.9897645474541	6.56665
144	60.5462679717013	60.3994474915272	60.2320415745606	34.08216
145	60.6269664093122	60.4354594371121	60.2628630470810	-31.29054
146	61.0109474570305	60.8684475054994	60.7024062292446	38.67574
147	61.1239527187132	61.0441024684306	60.9662121175370	-3.21063
148	61.4115342072578	61.2119672857141	61.0186924006065	-10.27910
149	61.5587984437803	61.4303593429586	61.3065363366288	-7.51435
150	61.9247168436665	61.6985271498968	61.4711358317666	1.94757
151	62.0534066648473	61.9206709782372	61.7889325755666	-1.61058
152	62.5004897884120	62.3130997428459	62.1233870112623	3.72744
153	62.7701828514039	62.5035855715646	62.2320392651335	7.91799
154	62.8349140114465	62.6766003559760	62.5168868428921	2.23346
155	63.0434102162710	62.8233260572492	62.6037999092209	-0.88822
156	63.1135361605491	63.0165312491457	62.8663262563690	84.42242
157	63.2474321722147	63.1313123485093	63.0571164348507	-66.40747
158	63.6413328426124	63.4607247944641	63.2270337792952	83.64696
159	63.7717351052318	63.5490731841636	63.3597550178458	-52.46930
160	63.9495284703867	63.7677309429520	63.6023524393080	-25.74817
161	64.3434347831028	64.1855730938482	64.0092629903896	28.74231
162	64.4753133257061	64.2729778323907	64.0877297177873	-26.58563
163	64.9149915161694	64.6983449390729	64.4747006090629	10.81597
164	65.1330060179969	64.9541305471785	64.7630566518247	18.78006
165	65.1927369935412	65.0613026197752	64.8603266553441	106.88626
166	65.2929075499894	65.1565711498598	65.0907918951851	-108.28861
167	65.5528713760440	65.3860743506444	65.2194267793186	-0.22857
168	65.8444891363516	65.6766636869104	65.4990587938539	14.89029

169	66.0967041447893	65.8577958398171	65.5766485682906	64.13662
170	66.1625375242612	65.9438498303366	65.7623171605534	-56.34343
171	66.3267335348749	66.0934549331000	65.8692461052988	-13.72265
172	66.6430308677892	66.4795308026602	66.3117178238823	6.48758
173	66.8323595969436	66.6020170641446	66.3743933537849	-4.08219
174	67.1180287612202	66.8444991171949	66.5663527725368	6.90663
175	67.2583944238003	67.1078830160189	66.9067224916544	75.47417
176	67.3130237767159	67.2145617150383	67.1188475143456	-4.08819
177	67.4956999972645	67.3137274690666	67.1739934022780	-62.74866
178	67.7602643541501	67.5694061165862	67.3502351504006	41.90170
179	67.8978196191092	67.7149668156679	67.5516233253504	-28.81093
180	68.2335861675719	68.0767709786627	67.8788404258844	60.39558

Tabela 1. Segundas diferenças para 180 níveis pertencentes a simetria A_2 com b=0.05, n_{max}=68 e δ b=0.00125.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	3.0366768397067	3.0358200087085	3.0349614673851	0.05634
2	5.1016028080961	5.0993882566196	5.0971628998769	0.21189
3	7.1199704220086	7.1172941022377	7.1146072370342	0.14817
4	7.3962259087361	7.3876692407917	7.3790688806469	0.59142
5	9.1611512498059	9.1577136241482	9.1542573348192	0.20380
6	9.7002892151139	9.6859339275513	9.6714781903689	1.03707
7	11.1926486732456	11.1885764476751	11.1844808556513	0.20884
8	11.6931873218590	11.6781779162791	11.6630932686211	0.64430
9	12.1289735498092	12.1064947655770	12.0838382472007	1.46809
10	13.2249746919403	13.2203028667756	13.2156024043574	0.21662
11	13.9377586131295	13.9186262207599	13.8993617103947	0.94922
12	14.6317864387018	14.6002591148219	14.5684519816437	1.91647
13	15.2556082608491	15.2503604179995	15.2450796699782	0.21577
14	16.0525624351696	16.0306250250816	16.0085439859061	0.89597
15	16.4658054226147	16.4360297328341	16.4060499405016	1.24180
16	17.2151931841250	17.1734777801529	17.1313386893125	2.46710
17	17.2854828802373	17.2796377502833	17.2737786629404	0.08077
18	18.2256423342727	18.2009506657989	18.1760793109137	0.98724
19	18.9431562869798	18.9055922373305	18.8677050813100	1.70905
20	19.3144191089986	19.3080550858904	19.3016560534761	0.18132
21	19.8702869356676	19.8173897548155	19.7639461684103	2.75720
22	20.3689515981174	20.3415412286950	20.3139264312555	1.00498
23	20.9990157528212	20.9580555016541	20.9168054826657	1.38261
24	21.3426551868886	21.3357237850361	21.3287473640668	0.21100
25	21.5496600479238	21.5014479611220	21.4528109978860	1.97604
26	22.5128791484952	22.4825047578345	22.4494554421257	11.89781
27	22.5940099757961	22.5295945864433	22.4669141518023	-7.70078
28	23.3626314500745	23.3272062263731	23.2821140221630	41.44080
29	23.3838742378026	23.3656590390648	23.3566936521529	-39.58721
30	24.2040568850406	24.1452565759388	24.0858459429514	2.52772
31	24.6530707972342	24.6206606645819	24.5880071017070	0.98872
32	25.3781426565664	25.3007318668087	25.2223536487282	3.82372
33	25.3974656060935	25.3892782972768	25.3809748122681	0.45758
34	25.5838225328857	25.5326143384266	25.4811490126856	1.00707
35	26.0962051566206	26.0357774946845	25.9748685319833	1.84861
36	26.7850827058080	26.7500080228458	26.7141515889427	2.92243
37	26.9343678860307	26.8641067940311	26.7935805895026	0.98687
38	27.4254910788968	27.4167464173157	27.4079970976668	0.01699
39	27.8577989175088	27.8029206215521	27.7475537801553	1.75717

40	28.2250141529515	28.1340077383941	28.0419032066211	3.90317
41	28.6985000122406	28.6304097940314	28.5614208687397	3.13899
42	28.9234007772399	28.8856220937417	28.8477595251777	0.29040
43	29.4538895676028	29.4442963739438	29.4347579476829	-0.18600
44	29.7148557252948	29.6322422656703	29.5486053156040	3.45398
45	30.0972487222797	30.0377619046564	29.9778077733283	1.55575
46	30.8402416560687	30.7660481929340	30.6908344376092	3.31629
47	31.0499177369226	31.0100566084759	30.9158644497214	175.20455
48	31.1268125948414	31.0220278617644	30.9700829048602	-170.32986
49	31.4610453861053	31.3791965251127	31.2963562121649	3.15958
50	31.4840711926623	31.4729327235281	31.4622803887556	-1.54461
51	32.3250219481227	32.2622995149337	32.1987751975543	2.48551
52	32.5667611851707	32.4708242925080	32.3729165899711	2.98980
53	33.1566785324927	33.1144183825474	33.0695215513342	7.96234
54	33.3312463233270	33.2529180415505	33.1756230190878	-3.10727
55	33.5168604701461	33.5039159794606	33.4915695060154	-1.78492
56	34.0748586606985	33.9576479706331	33.8381855270829	6.63106
57	34.2371153058808	34.1427803835151	34.0478518047505	1.73875
58	34.5652680356507	34.4977586261231	34.4298283151698	1.22008
59	35.2794373900785	35.2389924371684	35.1962131489246	6.62430
60	35.4452031583847	35.3388915650649	35.2312621332998	3.72914
61	35.5531256099629	35.5293452574498	35.4532547827740	147.23075
62	35.6377309895778	35.5549614616779	35.5257675522941	-150.68394
63	36.2139292914352	36.1155934024099	36.0162997924318	2.65182
64	36.7662790723026	36.6969889986833	36.6266299054215	2.91310
65	37.0437312138441	36.9242746569249	36.7989129850803	15.99250
66	37.1457453797453	37.0240786873603	36.9055583426919	-8.49811
67	37.3867182230110	37.3499992698805	37.3104879748131	7.47615
68	37.6079892343416	37.5844020835156	37.5635453994285	-7.26489
69	37.9702437806456	37.8786975571807	37.7862556230340	2.36468
70	38.4107178479726	38.2872060028711	38.1620598322380	4.26859
71	38.8642997477254	38.7708583278254	38.6726856458644	12.20314
72	39.0392010084240	38.9544262321016	38.8720824719643	-6.24067
73	39.4704390398483	39.4411725662106	39.4078687273601	10.23642
74	39.6888924711332	39.6526387456392	39.6207834677682	-11.09245
75	39.9447603796935	39.8273352796459	39.7073605672151	6.40166
76	40.1678491666812	40.0191803283446	39.8686682789120	4.60582
77	40.3117336346655	40.2108410462591	40.1098416952906	0.26551
78	41.0829649139546	40.9869443969796	40.8836252355881	17.80724
79	41.2374431535836	41.1473591921329	41.0607311176611	-8.39881
80	41.4132227539534	41.2757025683795	41.1366496163779	3.71348
81	41.5310092200368	41.5075549750501	41.4813450611636	6.63896
82	41.7967207097769	41.6990561170922	41.5760301288084	60.82007
83	41.8286405282608	41.7531236526968	41.7060097901724	-68.02608
84	42.5762353117397	42.4758373897037	42.3739971338089	3.39566
85	42.9375764063621	42.8042404058790	42.6692514280642	3.86171
86	43.2727276374811	43.1058233497816	42.9367821748455	4.95731
87	43.3299624529258	43.2602113721771	43.1864050718954	9.37402
88	43.5742160798197	43.5443649064587	43.4754749934147	89.65279
89	43.7318403150174	43.6218429471017	43.5493579200485	-85.99440
90	43.9429598254301	43.8800439798212	43.8207318685424	-8.21270
91	44.4220534488091	44.2748494334458	44.1244374750913	7.24552
92	44.6696322699830	44.5391701495841	44.4063215667409	5.35812
93	44.9458139471224	44.8320627004708	44.7186906921111	-0.84591
94	45.4833852470309	45.4291152543164	45.3649566152286	21.76720
95	45.6511012660865	45.6137724484928	45.5716690258918	10.46746
96	45.8652382544843	45.7277544279903	45.5986812822630	-18.39295
97	46.0708483965948	45.9802734524507	45.8663131487725	50.85955
98	46.1766367975043	46.0594581039543	45.9679741273280	-55.78597

99	46.4217432575344	46.2382812436404	46.0524771976873	5.06514
100	46.7529126585694	46.6138112058345	46.4724557464055	4.83549
101	47.1584082581171	47.0501985688319	46.9401430944296	3.92301
102	47.4796673432168	47.3228577837350	47.1619957647739	8.56343
103	47.5658797387646	47.5330195024946	47.4243339740992	159.52130
104	47.7425699212720	47.5908096549598	47.5004986082083	-129.11993
105	47.7898796736902	47.7223814189718	47.6677342389450	-26.92882
106	48.2515005526356	48.1700761862545	48.0894757836669	-1.71053
107	48.5053665951144	48.3739271289553	48.2421691118666	0.65852
108	48.9752665244023	48.8134632815928	48.6494372175508	4.55371
109	49.3189043872038	49.2062688174116	49.0875837797735	12.29410
110	49.5864699093520	49.4105966071650	49.2085799553472	52.91041
111	49.6126141754064	49.4983506304322	49.3651896415189	38.17793
112	49.6710747742700	49.6018704834669	49.5715874592937	-78.46734
113	49.9529836217500	49.8760875921404	49.8028401758903	-7.31536
114	50.4438055198343	50.3176659531893	50.1592818090501	64.08202
115	50.4870293405021	50.3638472641100	50.2705993959169	-59.43590
116	50.7684456830661	50.5937508275106	50.4158555551712	6.32572
117	50.9895532362933	50.8354722385583	50.6825518459011	-2.28306
118	51.5559224263071	51.4601571362123	51.3462805450109	35.19480
119	51.6572361842122	51.6181864306298	51.5540568819737	48.58713
120	51.8713331505036	51.7339088529894	51.6280873667855	-61.08723
121	52.0881242176625	51.9297034092377	51.7567283722280	28.02679
122	52.1534168545510	52.0481795609054	51.9607950065789	-34.30041
123	52.5905137421098	52.4222877453232	52.2515257667295	4.83760
124	52.6662088855465	52.5626153662782	52.4092568540364	94.67754
125	52.8466044496402	52.6295206888854	52.4616715206549	-93.54938
126	53.2083562261801	53.0665937160874	52.9223958355303	4.58927
127	53.6232157679024	53.4522597118387	53.2734571545890	14.67946
128	53.6460938798756	53.6173726911708	53.5742731991787	26.81650
129	53.8563631542874	53.7636835308226	53.5854318647855	159.16328
130	53.9929193659507	53.7897895270279	53.6841191550941	-181.18581
131	54.2561506757443	54.1610101416616	54.0616538763241	7.78370
132	54.5483341386873	54.3926034161656	54.2410174884659	-7.62014
133	54.9026888215335	54.7865711469547	54.6724891768253	-3.71570
134	55.1280145235025	54.9438529756887	54.7561770624828	6.39628
135	55.4091203191580	55.2490492566840	55.0841763421969	8.69128
136	55.6660105275261	55.5941609732649	55.4327568326300	161.08632
137	55.7711242114406	55.6614983410293	55.6370467848224	-153.02196
138	56.0712679092288	55.8843790279064	55.6469238162721	90.48384
139	56.1189320800412	55.9743316697948	55.8763472518742	-83.28102
140	56.4697765325780	56.3552484342603	56.2148592771835	45.88935
141	56.6118128637510	56.4444189156591	56.3018478311365	-43.97753
142	57.0090451909745	56.8308328117583	56.6435555300691	15.95068
143	57.1617291660585	56.9985436324238	56.7967595433574	7.71849
144	57.2492475997181	57.0586576247767	56.9139409899037	-80.39681
145	57.6049466663418	57.4362642886570	57.2601655473944	12.91234
146	57.6927106397520	57.6730308312384	57.6171152845447	62.82961
147	57.9382177952086	57.7909269232575	57.6755879493350	-55.28878
148	58.2345287171551	58.0686888264982	57.8699959747703	56.57603
149	58.2909150952424	58.1591188616345	58.0576847283268	-52.20523
150	58.6970731320904	58.5315145285680	58.3300280149515	61.38216
151	58.7614143094567	58.6055694840193	58.4868958203163	-63.42599
152	59.3044639860392	59.1445856722561	58.9192974409012	110.59325
153	59.4256904479775	59.1792642824094	58.9859879367203	-89.81156
154	59.4702317655940	59.3142589108436	59.1652023352992	-11.66040
155	59.7128396771343	59.6748107632027	59.4661091671176	286.00456
156	59.8811674767003	59.6970362514529	59.6776347314064	-275.94285
157	60.0448059569511	59.9119618870277	59.7722213170798	11.51106

158	60.3604213855852	60.2060555069731	59.9720077456834	132.34862
159	60.4626646905460	60.2716830332940	60.1488702245002	-113.10261
160	60.7029792414583	60.5287923372339	60.3602148105369	-9.26729
161	60.9977091181436	60.8589610843725	60.7260873982763	-9.65240
162	61.3267560898177	61.1274668164521	60.9234162418204	7.78914
163	61.6391279100530	61.4656048538473	61.2750065784104	27.78012
164	61.7322109690128	61.5704033938365	61.4015736150421	11.40516
165	61.7544565904146	61.7187962943445	61.6585106742516	39.89923
166	62.0635859846369	61.8642643263976	61.7051676856894	-65.02141
167	62.3046790366207	62.1846332538661	62.0545572680931	16.12971
168	62.5874305360029	62.4528950451965	62.2285418664432	143.81669
169	62.7640931612637	62.5021925997929	62.3180269220409	-124.37145
170	62.8493082766141	62.6609308182735	62.4832798182426	-17.11826
171	63.1518677286735	62.9653169117460	62.7629672519651	25.09134
172	63.3233787215082	63.1445731660599	62.9841548702936	-29.11930
173	63.6650632705492	63.4419213741398	63.2047965306511	22.04055
174	63.7544253741726	63.5476832642899	63.3065887800377	54.05763
175	63.7946666077710	63.7392815373169	63.6332555772369	79.45005
176	63.9566501133151	63.7946317154726	63.7233836413603	-142.28521
177	64.1970091268351	64.0168596131357	63.8308007290782	9.23096
178	64.4537956749477	64.3302850554768	64.1480976845317	91.21171
179	64.6230655687522	64.4292147827311	64.2846545252340	-76.50338
180	64.8800345616022	64.7389831292171	64.6027630054306	-7.46275

Tabela 2. Segundas diferenças para 180 níveis pertencentes a simetria B_1 com b=0.05, n_{max}=68 e δ b=0.00125.

i	$E_i(b-\delta b)$	$E_i(b)$	$E_i(b+\delta b)$	$-\Delta^2 E_i \times 10^5$
1	3.1065663411201	3.1041453992821	3.1017167359970	0.24875
2	5.3006274332115	5.2941408636116	5.2876204079394	0.64007
3	7.2743665299208	7.2682148316030	7.2620404832105	0.31163
4	7.6220028181712	7.6090363758329	7.5959866315449	1.09478
5	9.4356642988840	9.4264908431650	9.4172629218958	0.57779
6	10.0338037028258	10.0129338750048	9.9919080572420	1.55788
7	11.5037603365506	11.4929288699380	11.4820394538731	0.50422
8	11.8549956745345	11.8371603195042	11.8192154394727	0.92526
9	12.5345443254872	12.5043895262839	12.4739846924610	1.99957
10	13.6149811142096	13.6022342970414	13.5894070562783	0.59125
11	14.2523748355174	14.2275445162664	14.2025182177412	1.37746
12	15.1154461395610	15.0748524258810	15.0338941330791	2.41846
13	15.7053151088171	15.6908043693517	15.6761987922793	0.60442
14	16.2729936435372	16.2462244857174	16.2192933075325	0.99728
15	16.7746774589119	16.7403752821302	16.7057777263623	1.76447
16	17.7707332454593	17.7188329659350	17.6663153719121	3.48395
17	17.7972605766637	17.7809372096227	17.7646243182798	-0.05892
18	18.5889661451226	18.5573855473818	18.5255628249575	1.30473
19	19.3578453627786	19.3135922056890	19.2689134616126	2.20356
20	19.8846409671387	19.8668474964276	19.8489366776441	0.59067
21	20.4961181616446	20.4316947395980	20.3666157306955	3.20868
22	20.7497219129733	20.7142201234222	20.6784560778012	1.26607
23	21.2161182049388	21.1720623426010	21.1276793536546	1.54509
24	21.9683889375843	21.9460687917780	21.9029883528898	94.59687
25	22.0179867481704	21.9656154111764	21.9333112727919	-91.35732
26	22.9771924247330	22.9383494439066	22.8991890416947	1.38380
27	23.2869542536052	23.2093141204711	23.1308527275690	3.53849
28	23.7618880424316	23.7096733053126	23.6569520189519	2.13647

29	24.0542435683764	24.0331444427980	24.0119549152362	0.37616
30	24.7388380292123	24.6718095043602	24.6040301179235	3.04340
31	25.1695506038565	25.1271121481506	25.0843338251874	1.35259
32	25.8589307043621	25.8018399618965	25.7442474705099	1.94462
33	26.1357470933083	26.0478475456455	25.9552885873130	17.88789
34	26.1393861664445	26.1130035223357	26.0901670923360	-13.58026
35	26.4469653470357	26.3827864822383	26.3180461932370	2.12799
36	27.3595171585792	27.3138360992597	27.2675098130010	2.36227
37	27.5270890854893	27.4476590600316	27.3675528106844	2.46369
38	28.2082701079177	28.1797909109910	28.1426976989270	30.56806
39	28.2965907068755	28.2382078728321	28.1877736207825	-28.14832
40	29.0484038884567	28.9430274752749	28.8360960248749	5.37275
41	29.1658357360439	29.0900849746760	29.0138114913064	1.79691
42	29.5491897905543	29.5002678848150	29.4509695511482	1.27602
43	30.2935746080253	30.2659878540588	30.1787327740374	197.14647
44	30.3639434612185	30.2735952486506	30.2412731892770	-191.67249
45	30.5475029101274	30.4781529712180	30.4086267678769	0.57833
46	31.0979840627668	31.0193445292825	30.9400255117093	2.19052
47	31.7209660818068	31.6693909395824	31.6170398217381	2.45024
48	31.9531005109027	31.8609338997910	31.7590588007497	30.47145
49	32.0273257538500	31.9104275145257	31.8010966152406	-23.71432
50	32.3760925056591	32.3481001843165	32.3200879620347	0.06152
51	32.8580791729831	32.7855383094497	32.7123040376188	2.11498
52	33.2678189607664	33.1613867071693	33.0535968307311	4.09399
53	33.7396275490130	33.6565590504448	33.5713511262945	6.35664
54	33.9168860075305	33.8588509565238	33.8014494846335	-1.87124
55	34.4597680475251	34.4292496441848	34.3988782400589	-0.42696
56	34.7883411701119	34.6890536804653	34.5882452100481	4.38461
57	35.0428365005313	34.9055654140006	34.7666667344764	4.66285
58	35.1457051396202	35.0669253824950	34.9876863565040	1.30969
59	35.9250014066910	35.8358306345839	35.7437374842703	8.15491
60	36.0816820014586	36.0207815908799	35.9605295192913	-1.79990
61	36.2189743067106	36.0986965378906	35.9771233686648	3.58850
62	36.5456794598777	36.4847750652564	36.3831821875193	111.52181
63	36.5902395824222	36.5151061592935	36.4802747230624	-110.37072
64	37.3999490356848	37.3189126372910	37.2367944461961	2.89878
65	37.7068769969258	37.5929578077419	37.4777913503311	3.31782
66	38.1146107316907	37.9606066616066	37.8047259589409	4.94363
67	38.2024865907457	38.1449304948374	38.0851059462301	5.94693
68	38.4755513068002	38.3783265652364	38.2802868333265	2.12357
69	38.6446406195094	38.6046224277742	38.5662451969910	-4.25069
70	39.2017294153700	39.0704003413046	38.9362943697670	7.10742
71	39.4091990977733	39.2960249452618	39.1816947090780	2.94199
72	39.6976121543104	39.6087576771352	39.5197170121487	0.47007
73	40.3581279236058	40.3023779902328	40.2443640036299	5.61767
74	40.6135434827543	40.4922682846227	40.3681787697280	6.95026
75	40.7385855530836	40.6843922280649	40.6034171555204	65.82806
76	40.8493977175977	40.7448090249046	40.6690297579546	-70.70698
77	41.2353284303096	41.0644056016197	40.8913257276824	5.25283
78	41.4358206964146	41.3169237627899	41.1966206344872	3.40344
79	41.9135941550627	41.8254640915445	41.7358989111145	3.43120
80	42.2164689105777	42.0776641823794	41.9348820700292	9.45248
81	42.3930028189658	42.2545100349901	42.1163278526460	-0.73507
82	42.4994508587827	42.4454475266786	42.3896450861855	4.23864
83	42.8634799656167	42.8095293668616	42.7575873335598	-4.69187
84	43.1876613450640	43.0761624326396	42.9636673176687	2.31265
85	43.6484743988349	43.5064808668089	43.3625587921673	4.43277
86	44.0573962154924	43.9554256104301	43.8477452116832	12.98996
87	44.2882603453363	44.1744216268586	44.0238376009766	83.18232

88	44.4030554809191	44.2150022505772	44.0631727876962	-81.92642
89	44.6272362927923	44.5747126565338	44.5207259081855	3.28238
90	45.0081772663355	44.9435041711112	44.8797326538369	-2.00603
91	45.1751090173978	45.0380271656808	44.8990115981071	4.29352
92	45.4171756182381	45.2557646161495	45.0919779134135	5.24950
93	45.5941508002637	45.4677958848578	45.3421012813121	-1.45226
94	46.2969710816496	46.1962041939103	46.0871130108861	18.01944
95	46.5068898570545	46.3878926501280	46.2700541367681	-2.49784
96	46.7071181348920	46.5533725441740	46.3960263772665	7.73430
97	46.7529496821591	46.6946257305503	46.6393523354682	-6.53299
98	47.1535033583390	47.0139974309885	46.8674947079874	14.88237
99	47.1823060555019	47.0999785768671	47.0259008948135	-17.51550
100	47.6153730623120	47.4095731084183	47.2009757199206	5.90057
101	47.8472668858074	47.7265875673107	47.6040310680395	3.93320
102	48.2474158765480	48.0930891760510	47.9364486004663	4.81124
103	48.5348435568665	48.3866226050311	48.2002840301917	78.77719
104	48.5710658852566	48.4532315619687	48.3662595148790	-63.69498
105	48.8460245854618	48.7826649363602	48.7120094720302	14.95575
106	49.0906006294122	48.9569052076689	48.8301790940600	-14.23560
107	49.3663166511576	49.2772731360288	49.1913184514959	-6.26827
108	49.7313750632192	49.5665999083269	49.3982476714227	7.21672
109	50.0056623011693	49.8599346792871	49.7104702024427	7.49470
110	50.3069316125950	50.1661420398250	50.0256724023336	-0.63775
111	50.7072958133258	50.6370626622986	50.4201634819026	289.64166
112	50.8704618854758	50.6469186808297	50.5602794988478	-270.31066
113	51.0032540840992	50.9279287811439	50.8440936030294	16.70964
114	51.1979808120218	51.0480112666480	50.8978440687800	-18.22854
115	51.5065356192707	51.3714787148404	51.2210015618928	30.01714
116	51.6149049114616	51.4891094705377	51.3510265716158	23.86419
117	51.7620460614169	51.5626120189941	51.3901256777824	-52.26209
118	52.1495034788338	51.9927691922372	51.8321144433694	7.54040
119	52.4987858962048	52.3695691169191	52.2376784354146	5.10583
120	52.8153737580080	52.6543394037558	52.4749283554083	34.90063
121	52.8541327424040	52.7760880458905	52.7076211338756	-18.14796
122	53.1725606459658	53.0163592320188	52.8373441899185	43.03130
123	53.2214614261339	53.1078108559080	53.0211795252412	-50.87621
124	53.7454333914873	53.6314617632777	53.5129047440768	8.54982
125	53.9242356674322	53.7767834065512	53.6335132375261	-7.77676
126	54.1659409891382	53.9248087970593	53.6800685577119	6.69089
127	54.3882653861863	54.2045337434245	54.0185489889605	4.15668
128	54.6454488730675	54.5231085705584	54.3924354004904	15.28319
129	54.9119829566402	54.7541221308728	54.5342148710948	113.31829
130	54.9778012564909	54.8421311228560	54.7349904400343	-52.02105
131	55.1361317671139	54.9913109008863	54.8738839191194	-49.81493
132	55.4172142619597	55.3104822492845	55.2090544566956	-9.58990
133	55.8600237592857	55.6834281717219	55.5015589910988	9.47067
134	56.0075003989736	55.8838314209307	55.7578781646477	4.08755
135	56.2096850853584	56.0220334938956	55.8348656887893	-0.86356
136	56.4875735673309	56.3066022143416	56.1261242503652	-0.87625
137	56.8746236375878	56.7785062092752	56.6626664934484	34.73548
138	57.0666744599083	56.9756917547724	56.8819350821746	4.86869
139	57.3171095641881	57.1557077486950	56.9746561822762	34.37933
140	57.4989017388851	57.2429914860998	57.0111895564243	-42.11576
141	57.5726594941758	57.4021445890938	57.2150917768452	28.81061
142	57.6856605935559	57.5394841296837	57.4153769592316	-38.35504
143	58.1006405168284	57.9069647014196	57.7074719192216	10.04537
144	58.2569186269654	58.0208720613313	57.7848306890868	-0.00895
145	58.2626277610694	58.1318189623063	58.0025326845106	-2.61908
146	58.6576887766876	58.4946870936327	58.3282372613504	5.89481

147	58.9934636912062	58.8742574874569	58.6801240720830	127.26651
148	59.0894996255606	58.9515968056742	58.8732008975718	-100.94198
149	59.3090140981774	59.1963199151043	59.0706968474335	21.84069
150	59.5248748384253	59.3002316147699	59.0938644469668	-30.81954
151	59.7812965814604	59.6552980641120	59.5252361250327	6.81150
152	60.0977821839906	59.9204081152439	59.7468077020446	-6.29778
153	60.5311674769428	60.3737750011110	60.1836852776800	54.15803
154	60.6224919639170	60.4294230589206	60.2657752258486	-48.68667
155	60.8585678412814	60.5966844141486	60.3170202121581	29.34282
156	60.8904405955292	60.7040293416325	60.5237967004952	-10.17826
157	61.0770709781976	61.0102477345102	60.8974546426765	75.34775
158	61.3167994297122	61.1476032213034	61.0110570721061	-53.39548
159	61.5575738349785	61.3090663120248	61.0553217241440	8.54207
160	61.5976689461337	61.4556674330677	61.3267923711495	-21.35922
161	62.0189033441863	61.8461694732456	61.6549683633305	29.85996
162	62.1267489716387	61.9647476514878	61.8189627710558	-26.17043
163	62.5656538879670	62.3550432475217	62.1386447438317	9.28211
164	62.8047985878029	62.5906143247965	62.3612695742563	24.22166
165	62.8766637600943	62.6980092444271	62.5364774444137	-27.30982
166	63.0911128381947	62.9321058498002	62.7455449284580	43.78359
167	63.1716136267938	63.0930718373517	63.0207406266938	-9.84352
168	63.4793331848660	63.3150079166349	63.1568061938118	-9.67155
169	63.7900718601312	63.5761559072873	63.3496918806868	19.73708
170	63.8240131717066	63.6753946242378	63.5409802386479	-22.30714
171	64.2724741442678	63.9826099132297	63.6843303982619	13.15245
172	64.3273217897560	64.1334070508123	63.9056907260978	52.70511
173	64.3870982852280	64.2021938406096	64.0537780017188	-56.83389
174	64.8786417035758	64.6292724961996	64.3537684969176	40.43801
175	64.9343624750361	64.7149862886394	64.5146169073493	-29.37002
176	65.1466123064234	64.9812184624743	64.8122037961470	5.57211
177	65.2039435094600	65.1462721798959	64.9890327600295	152.83774
178	65.4452829130494	65.2235151390874	65.0914309045037	-137.50185
179	65.5548398989938	65.4011569446355	65.2493344049504	-2.84462
180	65.9275411114842	65.7549830706368	65.5125662206107	106.24109

Tabela 3. Segundas diferenças para 180 níveis pertencentes a simetria B_2 com b=0.05, n_{max}=68 e δ b=0.00125.

Referências bibliográficas.

1. Berry M V, Ann. of Phys. 131 (1981) 163
2. Berry M V and Tabor M, Proc. R. Soc. A 356 (1977) 375
3. Percival I C, J. Phys. B 6 (1973) L229
4. Nordholm K S and Rice S A, J. Chem. Phys. 61 (1974) 203
5. Nordholm K S and Rice S A, J. Chem. Phys. 61 (1974) 768
6. Pomphrey N, J. Phys. B 7 (1974) 1909.
7. Noid D W, Koszykowsky M L, Tabor M and Marcus R A, J. Chem. Phys. 72 (1980) 6169.
8. Pullen R A and Edmonds A R, J. Phys. A, 14 (1981) L319.
9. Leithold L, "O Cálculo Com Geometria Analítica", 2 edição, Editora Harper & Row do Brasil Ltda, (1982), Volume 2, seção 17.10.
10. Pullen R A and Edmonds A R, J. Phys. A 14 (1981) L477.
11. McDonald S W and Kaufman A N, Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 1189.
12. Bohigas O, Giannoni M J and Schmit C, Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 1.
13. Berry M V and Robnik M, J. Phys. A, 17 (1984) 2413
14. Seligman T H and Verbarschot J, J. Phys. A. 18 (1985) 2227.
15. Wintgen D and Friedrich H, Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 571.
16. Delande D and Gay J C, Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 2006.
17. Wunner G, Woelk U, Zech I, Zeller G, Erth T, Geyer F, Schwetzer W and Ruder H, Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 3261.
18. Reichl J and Buttner H, J. Phys. A 20 (1987) 6321.
19. Seligman T H, Verbaarschot J J M and Zirnbauer M R, J. Phys. A, 18 (1985) 2715.
20. Zimmermann T, Meyer H D, Koppel H and Cederbaum L S, Phys. Rev. A, 33 (1986) 4334
21. Wintgen D and Friedrich H, Phys. Rev. A, 35 (1987) 1464.
22. Caurier E and Grammaticos B, Europhys. Lett. 2 (1986) 417.
23. Berry M V and Robnik M, J. Phys. A, 17 (1984) 2413
24. Tinkham M, "Group Theory and Quantun Mechanics", McGraw-Hill, Inc. (1974).
25. Wigner E P, "Group Theory", Academic Press, New York (1959) edição alemã original (1931).
26. Douglas B E and Hollingsworth C A, "Symetry in Bonding and Spectra, an Introduction", Academic Press, Inc. (1985)
27. Schiff L I, "Quantum Mechanics", 3 edição, McGraw-Hill Book, New York (1968)
28. Louck J D and Shaffer W H, J. Mol. Spectr. 4 (1960) 285.
29. Noid D W and Marcus R A, J. Chem. Phys. 67 (1977) 559.