

Poznámky

23. března 2021

1 Výpočet spektra

Z (Iachello, Oss - Algebraic approach to molecular spectra: Two-dimensional problems) máme

$$\langle N, n+1, l \pm 1 | \hat{D}_{\pm} | N, n, l \rangle = \pm \sqrt{n \pm l + 2} \sqrt{N - n},$$

kde výraz platí pro oba operátory \hat{D}_{\pm} (\pm nealternuje). Dále pracujeme s hamiltoniánem

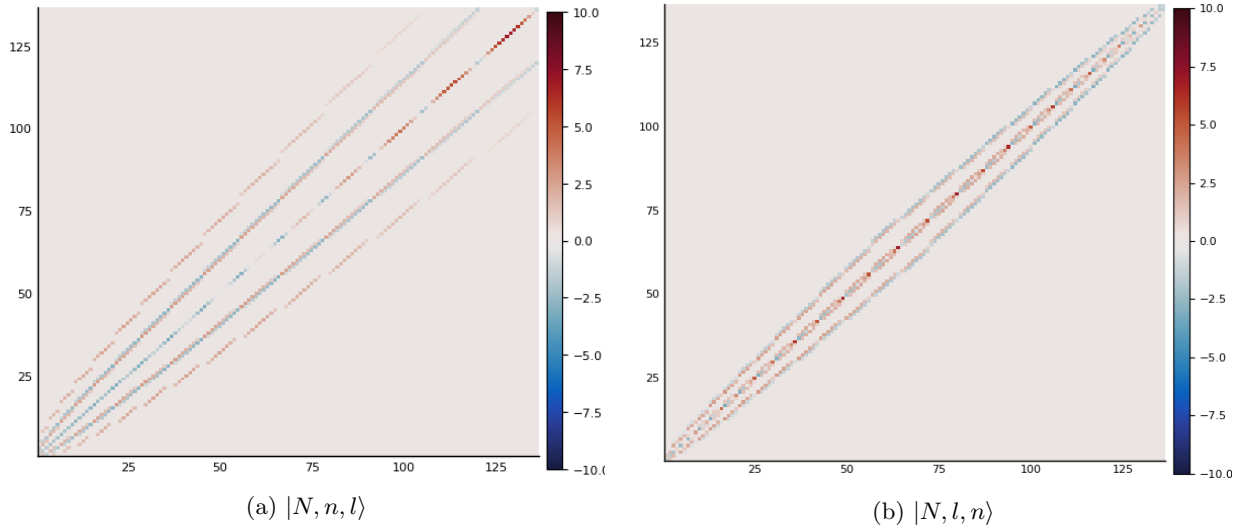
$$\hat{H} = (1 - \xi)\hat{n} - \frac{\xi}{N-1} \left[\frac{1}{2} (\hat{D}_+ \hat{D}_- + \hat{D}_- \hat{D}_+) + \hat{l}^2 \right] - \varepsilon \left[\frac{1}{2} (\hat{D}_+ + \hat{D}_-) \right].$$

Maticové elementy operátoru $\hat{W}^2 = \frac{1}{2} (\hat{D}_+ \hat{D}_- + \hat{D}_- \hat{D}_+) + \hat{l}^2$ vycházejí

$$\begin{aligned} & \langle N, n', \ell | \hat{W}^2 | N, n, \ell \rangle \\ &= \begin{cases} \sqrt{(N-n)(N-n-1)(n+\ell+2)(n-\ell+2)}, & n' = n+2, \\ [(n^2 - \ell^2) + (N-n)(N-n-1) - N^2], & n' = n \end{cases}, \end{aligned}$$

kde N^2 je rozdíl oproti výsledku Iachella (2003), který byl ale získán ze vztahů z (5.3) z (Iachello 1996). Je to jen konstanta, která posunuje spektrum.

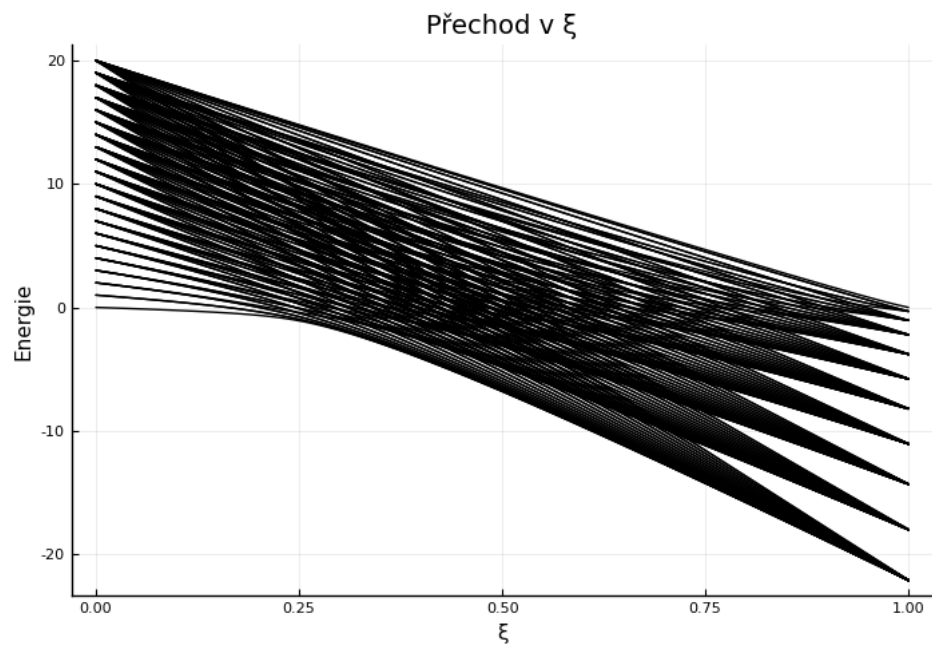
Ten jsme sestavili ve dvou bázích $|N, n, l\rangle$ a $|N, l, n\rangle$



Obrázek 1: Hamiltoniány ve dvou bázích

1.1 Diagonalizace

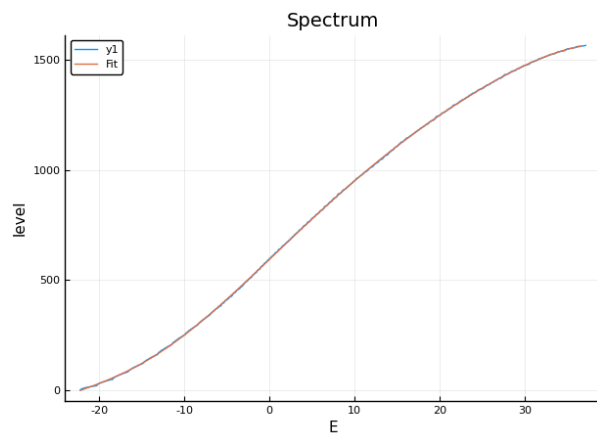
- `eigen()` - zatím nejrychlejší, ale neumí pracovat se sparse maticemi
- `eigs()` - z ArPack, umí sparse matice, ale řádově pomalejší
- `ArnoldiMethod` - Arnoldi, Krylov - zatím nejpomalejší, sparse matice



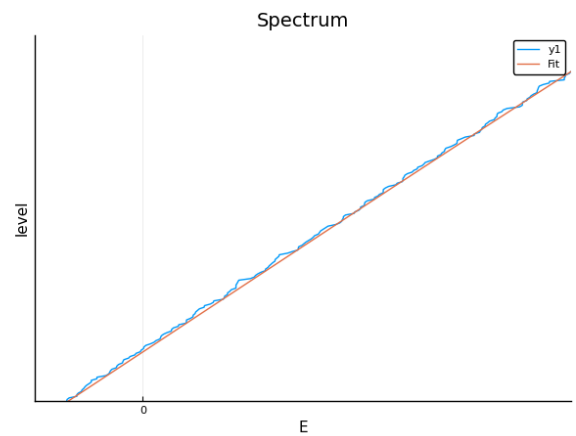
Obrázek 2: Závislost hladin na ξ

1.2 Úprava spektra

- degenerace
- polynomiální fit
- cut
- unfolding
- spacing

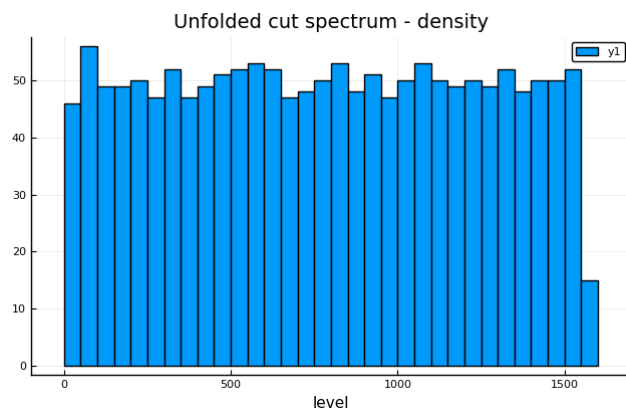


(a) Fit

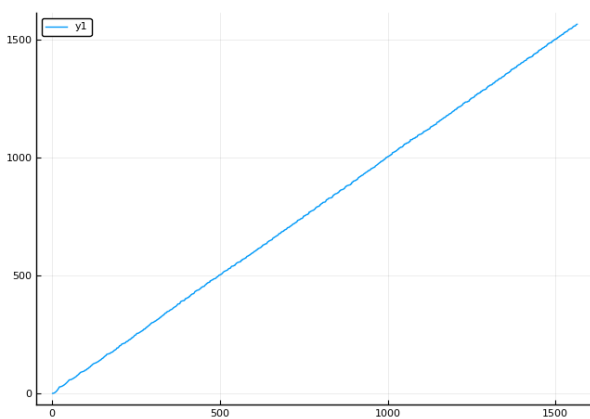


(b) Detail

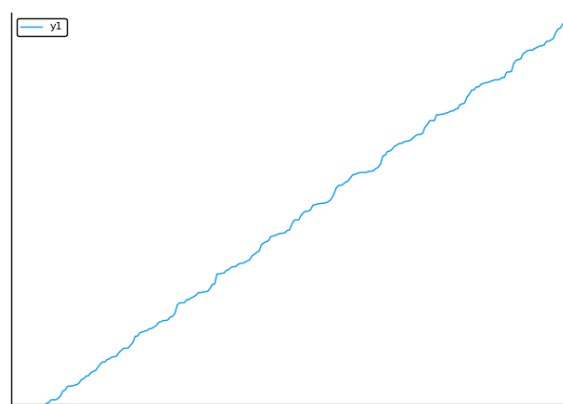
Obrázek 3: Polynomiální fit spektra



Obrázek 4: Hustota hladin



(a) Natažení



(b) Detail

Obrázek 5: Natažení spektra

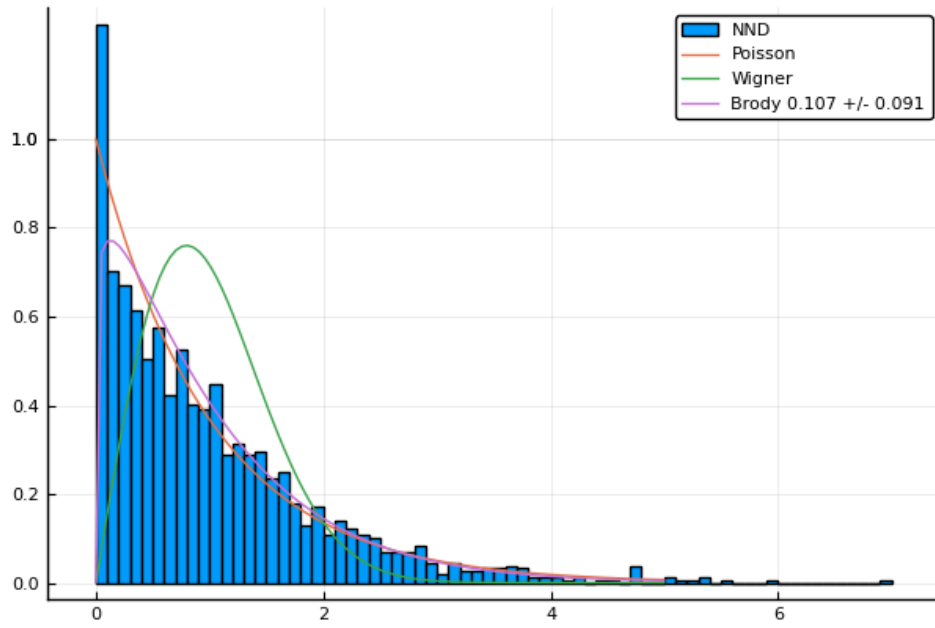
1.3 Indikátory chaosu

1.3.1 NNS - Brodyho parametr

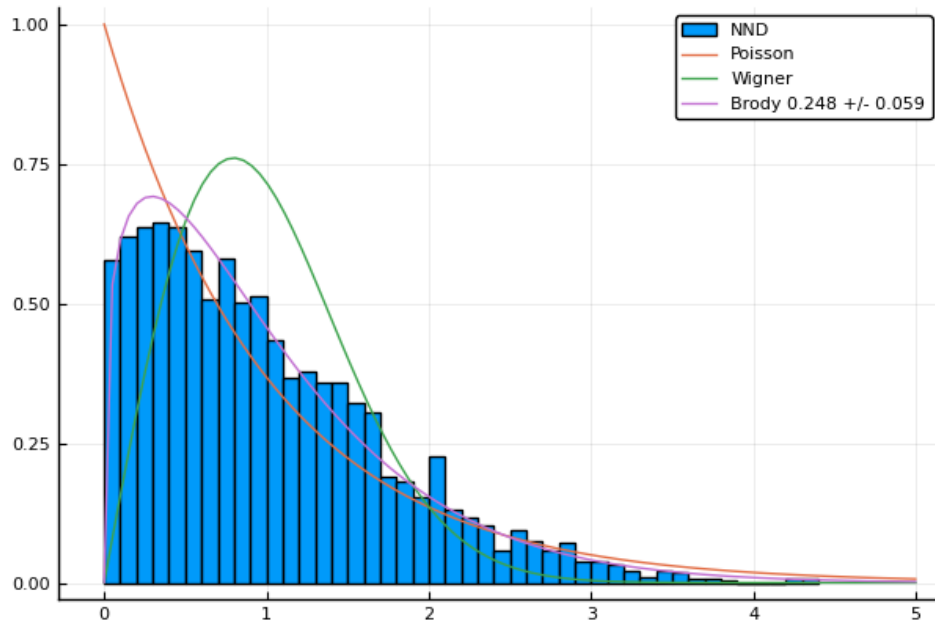
Brodyho parametr β získáváme fitem spektra NNS

$$P_B(s) = (\beta + 1)bs^\beta e^{-bs^{\beta+1}}, \quad b = \left[\Gamma\left(\frac{\beta + 2}{\beta + 1}\right) \right]^{\beta+1}$$

$\beta \rightarrow 0$ je Poissonovo rozdělení (regulární) a $\beta \rightarrow 1$ je Wignerovo rozdělení (chaotické).



Obrázek 6: Hustota hladin NNS s fitem



Obrázek 7: Hustota hladin NNS s fitem

1.3.2 η

$$\eta \equiv \frac{\overline{\min(1/r, r)} - I_P}{I_{WD} - I_P}$$

r - podíl dvou nejbližších NNS bez unfoldingu

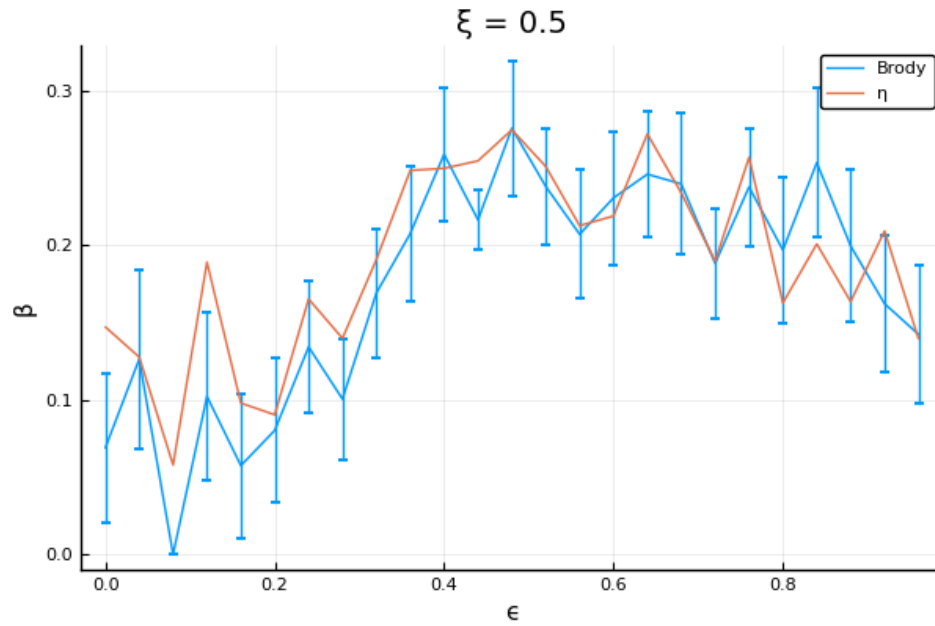
1.3.3 Delokalizace v bázi

Vlastní stavy jsou vyjádřeny v bázi $\{|\phi_j\rangle\}_{j=0}^{D-1}$ jako $|\psi_i\rangle = \sum a_{ij} |\phi_j\rangle$. Definujeme

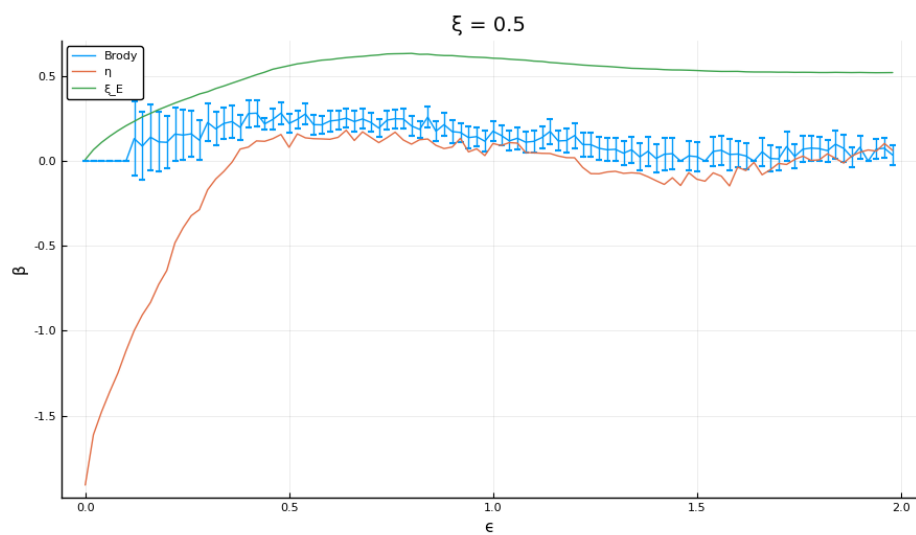
$$\xi_E(i) = \left(\sum_{j=0}^{D-1} |a_{ij}|^4 \right)^{-1}$$

$$\bar{\xi}_E = \frac{1}{D \xi_E^{\text{deloc}}} \sum_{i=0}^{D-1} \xi_E(i),$$

kde $\xi_E^{\text{deloc}} \approx \text{Dim}/3$.



Obrázek 8: Indikátory chaosu - bez degenerace



Obrázek 9: Indikátory chaosu - s degeneraci