Poznámky

7. března 2021

1 Výpočet spektra

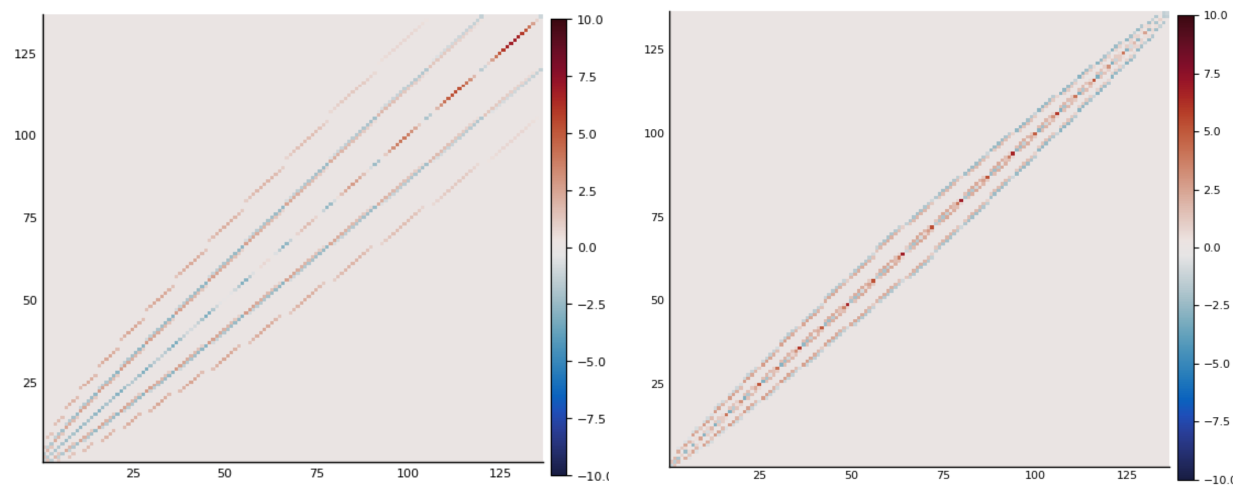
Z (Iachello, Oss - Algebraic approach to molecular spectra: Two-dimensional problems) máme

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

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

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

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

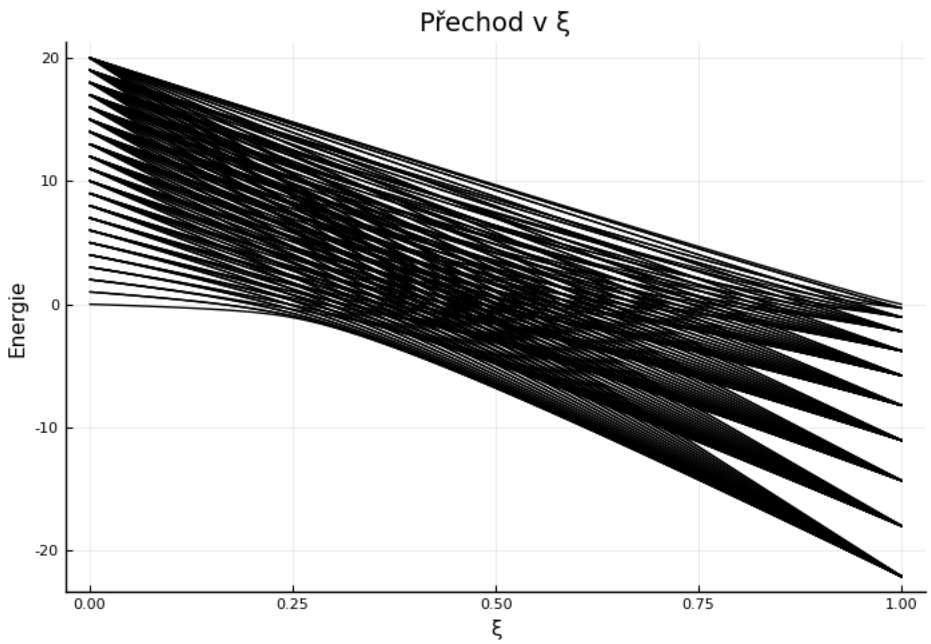


(a) $|N, n, l\rangle$ (b) $|N, l, n\rangle$

Obrázek 1: Hamiltoniány ve dvou bázích

1.1 Diagonalizace

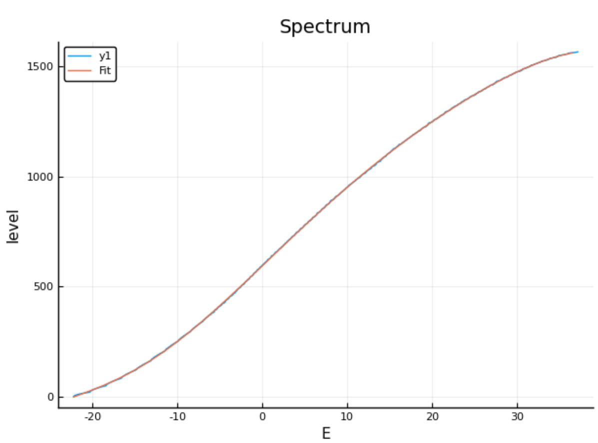
- `eigen()` - zatím nejrychlejší, ale neumí pracovat se sparse maticemi
- `eigs()` - z ArPack, umí sparse matice, ale řádově pomalejší
- `ArnoldiMethod` - Arnoldi,Krylov - zatím nejpomalejší, sparse matice



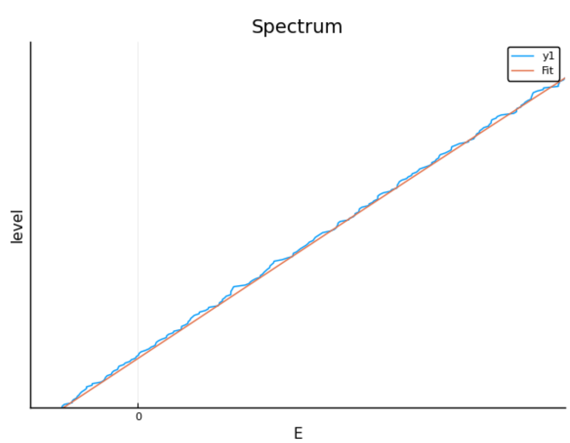
Obrázek 2: Závislost hladin na ξ

1.2 Úprava spektra

- degenerace
- polynomiální fit
- cut
- unfolding
- spacing

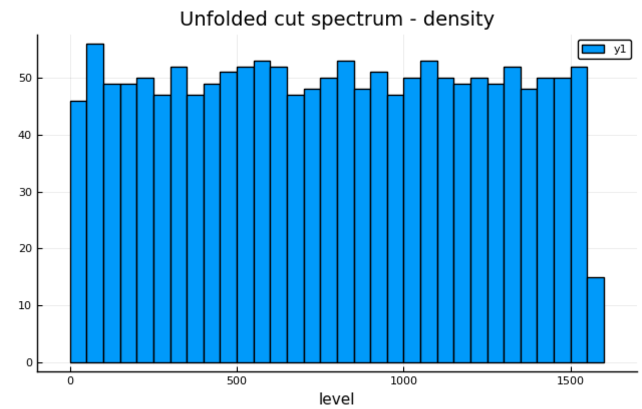


(a) Fit

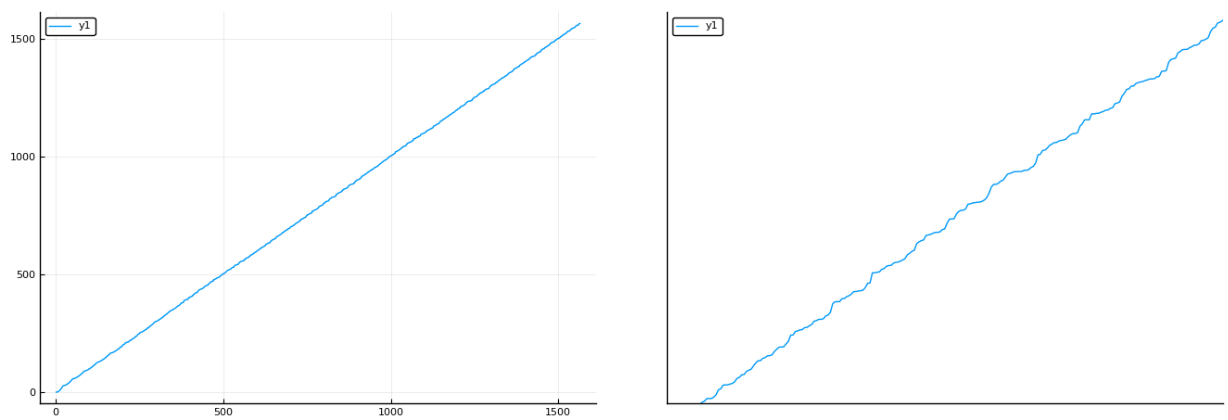


(b) Detail

Obrázek 3: Polynomiální fit spektra



Obrázek 4: Hustota hladin



(a) Natažení

(b) Detail

Obrázek 5: Natažení spektra

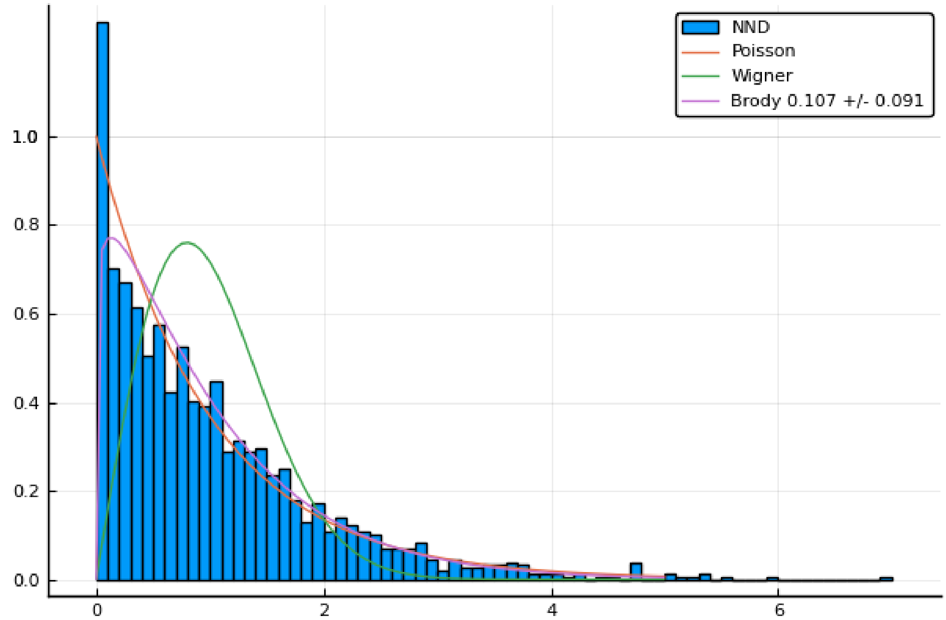
1.3 Indikátory chaosu

1.3.1 NNS - Brodyho parametr

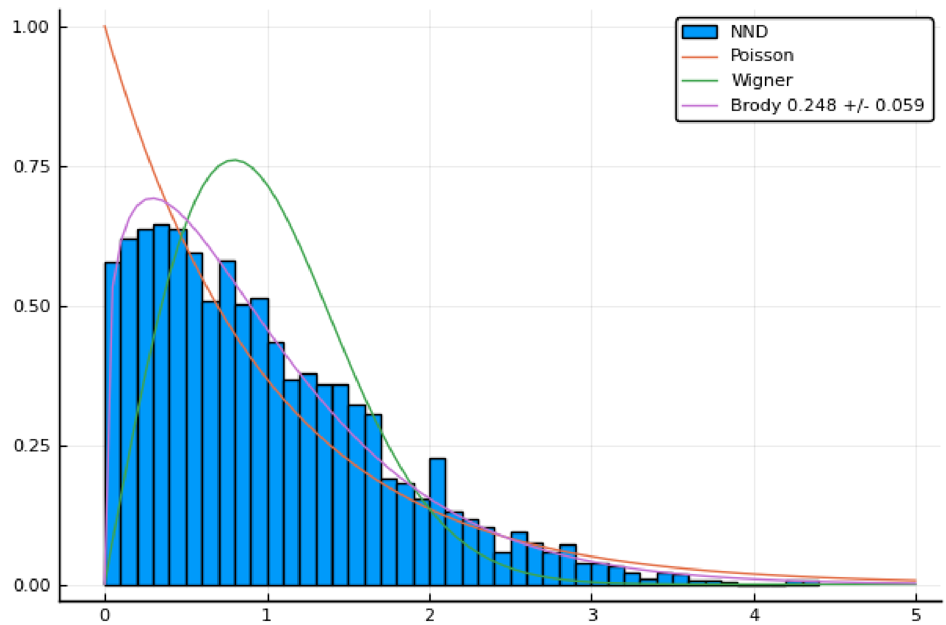
Brodyho parametr β získáváme fitem spektra NNS

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

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



Obrázek 6: Hustota hladin NNS s fitem



Obrázek 7: Hustota hladin NNS s fitem

1.3.2 η

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

r - podíl dvou nejbližších NNS bez unfoldingu

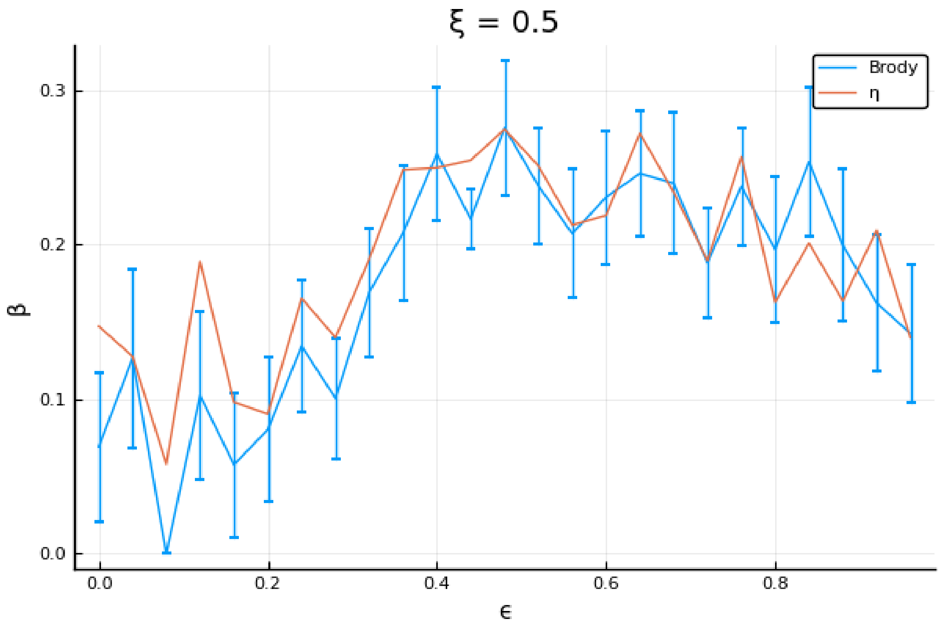
1.3.3 Delokalizace v bázi

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

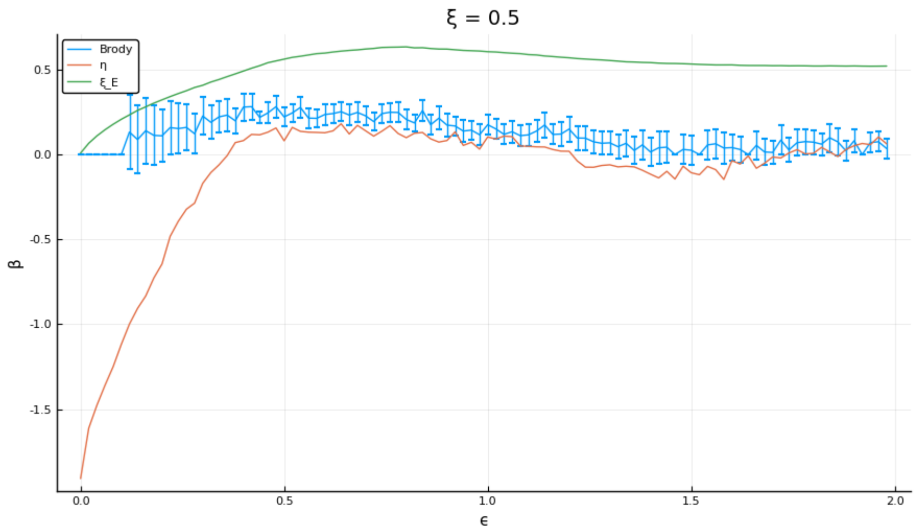
$$\xi_E(i) = \left(\sum_{j=0}^{D-1} |a_{ij}|^4 \right)^{-1}$$

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

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



Obrázek 8: Indikátory chaosu - bez degenerace



Obrázek 9: Indikátory chaosu - s degeneraci